

Quantum Espresso 6.8 with GPU support

ウェブページ

<https://www.quantum-espresso.org/>

(6.7 まで独立していたコードがメインブランチにマージされています)

バージョン

6.8

ビルド環境

- PGI 20.4
- CUDA 10.1 (PGI 20.4 付属)
- MKL 2020.0.2 (intel 2020 update 2)
- OpenMPI 3.1.6

ビルドに必要なファイル

- q-e-qe-6.8.tar.gz
 - patch_extlibs_makefile: ad hoc patch to enable cc70

```
--- install/extlibs_makefile.org 2021-12-15 12:32:45.000000000 +0900
+++ install/extlibs_makefile 2021-12-15 12:33:50.000000000 +0900
@@ -106,6 +106,7 @@
     --with-cuda-runtime=$(CUDA_RUNTIME) \
     --disable-parallel \
     --enable-cuda-env-check=no; \
+ sed -i -e "s/cc60/cc60,cc70/" make.inc include/configure.h install/make_lapack.inc; \
make all
touch ../install/libcuda_devxlib # do not download and configure again
```

- openmpi-3.1.6.tar.bz2
- (/local/apl/lx/pbs14 以下の PBS Pro 関連ファイル)

ビルド手順

OpenMPI 3.1.6

```
#!/bin/sh

VERSION=6.8
FULLVER=${VERSION}
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/QE/${VERSION}
INSTDIR=/local/apl/lx/espresso68-gpu

# nvhpc openmpi awares cuda, but not tm (PBS)...
WORKDIR=/work/users/${USER}
OMPIVER=3.1.6
OMPITARBALL=/home/users/${USER}/Software/OpenMPI/${OMPIVER}/openmpi-${OMPIVER}.tar.bz2
OMPIROOT=${INSTDIR}/openmpi-${OMPIVER}
PBSROOT=/local/apl/lx/pbs14

PARALLEL=12

#export CUDA_HOME=/local/apl/lx/nvhpc-21.9/Linux_x86_64/21.9/cuda
export CUDA_HOME=/local/apl/lx/cuda-10.1 # dummy

# -----
umask 0022

module purge
```

```

#module load nvhpc/21.9-nompi
module load pgi/20.4
module load mkl/2020.0.2

export LANG=C
export LC_ALL=C

ulimit -s unlimited

# build openmpi first
cd ${WORKDIR}
if [ -d openmpi-${OMPIVER} ]; then
  mv openmpi-${OMPIVER} openmpi-erase
  rm -rf openmpi-erase &
fi

tar jxf ${OMPITARBALL}
cd openmpi-${OMPIVER}

export CFLAGS="-fPIC"
export FCFLAGS="-fPIC"
export CXXFLAGS="-fPIC"
export LDFLAGS="-fPIC"

mkdir rccs && cd rccs
CC=pgcc CXX=pgc++ FC=pgf90 \
  ../configure --prefix=${OMPIROOT} \
    --with-tm=${PBSROOT} \
    --enable-mpi-cxx \
    --with-cuda=${CUDA_HOME} \
    --with-psm2
make -j ${PARALLEL} && make install && make check

```

■ テスト結果

- atomic 関連テストに fail している

QE

```

#!/bin/sh

VERSION=6.8
FULLVER=${VERSION}
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/QE/${VERSION}
TARBALL=${BASEDIR}/q-e-qe-${FULLVER}.tar.gz
INSTDIR=/local/apl/lx/espresso68-gpu

PATCH0=${BASEDIR}/patch_extlibs_makefile

# nvhpc openmpi awares cuda, but not tm (PBS)...
OMPIVER=3.1.6
OMPIROOT=${INSTDIR}/openmpi-${OMPIVER}

PARALLEL=12

#export CUDA_HOME=/local/apl/lx/nvhpc-21.9/Linux_x86_64/21.9/cuda
export CUDA_HOME=/local/apl/lx/cuda-10.1 # dummy

# -----
umask 0022

module purge
#module load nvhpc/21.9-nompi
module load pgi/20.4
module load mkl/2020.0.2

```

```

export LANG=C
export LC_ALL=C

ulimit -s unlimited

# openmpi setting
export OMPI_MCA_btl_openib_allow_ib=1
export CPATH="${OMPIROOT}/include:${CPATH}"
export LIBRARY_PATH="${OMPIROOT}/lib:${LIBRARY_PATH}"
export LD_LIBRARY_PATH="${OMPIROOT}/lib:${LD_LIBRARY_PATH}"
export PATH="${OMPIROOT}/bin:${PATH}"

# qe build
cd ${INSTDIR}
if [ -d q-e-qe-${FULLVER} ]; then
  mv q-e-qe-${FULLVER} q-e-qe-erase
  rm -rf q-e-qe-erase &
fi

tar zxf ${TARBALL}
cd q-e-qe-${FULLVER}
mv *.[a-zA-Z]* ./
cd ../ && rmdir q-e-qe-${FULLVER}

export MPIF90=mpif90

patch -p0 < ${PATCH0}
# complicated...
sed -i -e 's/cc$(GPU_ARCH)/cc60,cc70/' install/Makefile.lib_eigsolve

./configure --enable-openmp \
  --enable-openacc \
  --with-scalapack=no \
  --with-cuda=${CUDA_HOME} \
  --with-cuda-cc=60 \
  --with-cuda-runtime=10.1

# force to add curand to library list
sed -i -e "s/cusolver/cusolver,curand/" make.inc
# add cc70 (is it really ok?)
sed -i -e "s/cc60/cc60,cc70/" \
  make.inc \
  install/make_lapack.inc \
  install/make_wannier90.inc \
  include/configure.h

make -j${PARALLEL} all # neb may fail...

cd test-suite
make run-tests-serial
make clean
make run-tests-parallel
cd ..

```

メモ

- beef.in, beef-spin.in のテストに失敗(openacc 未対応のため)。他は全てパス。シリアルでも並列でも同様です。
- 今回は openacc も有効にしています
- ~~V100 用のフラグ等を指定していますが、現状 V100 では動作しません。P100 でご利用ください。~~
 - 原因については今のところ不明です。パッチ無しで ~~--with-cuda-cc=70~~ を指定した場合ですら動作していません。
 - nvhpc 21.9 を使っているため、cuFFT のバグ <https://gitlab.com/QEF/q-e/-/issues/315> も影響ないはずです。(リンク先にある環境変数を設定しても結果は変わりません)
 - CUDA のバージョンか GPU ドライバのバージョンが影響している可能性があります。ドライバが原因だった場合はバージョン更新によって動作が正常になる可能性があります。
 - pgi 20.4 を使うことで MPI 関連のエラーに加えてこちらの問題も解消しました

- OpenMPI 4.x では OpenMPI のテストが追加でいくつか失敗するため、回避しています。
- ausurf 系でのベンチマーク結果(WALL の値; -nk 1 -nb 1 -nt 1)
 - cpu 16 コア(small 相当): 209.05s
 - P100*2 (cpu 2 コア, gpu 2 枚, 同一ノード): 39.70s
 - P100*1 (16 GB)ではメモリ不足で動作せず。(6.7 と同様)
 - V100*1 (cpu 1 コア, 1 gpu): 49.88s