

Quantum Espresso 7.2 with GPU support (HPE)

ウェッページ

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

バージョン

7.2

ビルド環境

- NVIDIA HPC SDK 22.11 (nomp version)
- Intel MKL 2023.1.0
- OpenMPI 3.1.6

ビルドに必要なファイル

- qe-7.2-ReleasePack.tgz

ビルド手順

```
#!/bin/sh

QE_VERSION=7.2
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/QE/${QE_VERSION}
#TARBALL=${BASEDIR}/q-e-qe-${QE_VERSION}.tar.gz
TARBALL=${BASEDIR}/qe-${QE_VERSION}-ReleasePack.tar.gz

INSTDIR=/apl/qe/7.2-gpu
PARALLEL=12

CUDA_HOME=/apl/nvhpc/22.11/Linux_x86_64/22.11/cuda/11.8

# -----
umask 0022

module -s purge
module -s load nvhpc/22.11-nompi
module -s load mkl/2023.1.0
module -s load openmpi/3.1.6/nv22

export LANG=C
export LC_ALL=C
ulimit -s unlimited

cd ${INSTDIR}
if [ -d qe-${QE_VERSION} ]; then
  mv qe-${QE_VERSION} qe-erase
  rm -rf qe-erase &
fi

tar xzf ${TARBALL}
mv qe-${QE_VERSION}/* .
mv qe-${QE_VERSION}/[a-z]* .
rmdir qe-${QE_VERSION}

sed -i -e "s/wget -O/wget --trust-server-names -O/" \
  -e "s/curl -o/curl -L -o/" test-suite/check_pseudo.sh

export MPIF90=mpif90
export MPIFC=mpif90
export MPIF77=mpif90
export MPICC=mpicc
```

```

export MPICXX=mpicxx

rm -rf external/{devxlib,mbd}
mkdir external/devxlib
mkdir external/mbd

FC=nvfortran F90=nvfortran F77=nvfortran CC=nvc CXX=nvc++ \
./configure --enable-openmp \
    --enable-openacc \
    --with-scalapack=no \
    --with-cuda=${CUDA_HOME} \
    --with-cuda-cc=80 \
    --with-cuda-runtime=11.8

for i in w90; do
    echo "==== $i ====="
    make $i
done

# pwall(pw neb ph pp pwcond acfdt) cp ld1 tddft hp xspectra gwl
echo "==== all ====="
make -j${PARALLEL} all

cd test-suite
make pseudo
cd ..

```

テスト

ログインノードには GPU が無いため、以下のようなジョブとして実行。

```

#!/bin/sh
#PBS -l select=1:ncpus=4:mpiprocs=4:ompthreads=1:ngpus=4
#PBS -l walltime=48:00:00

cd $PBS_O_O_WORKDIR

umask 0022
module -s purge
module -s load nvhpc/22.11-nompi
module -s load mkl/2023.1.0
module -s load openmpi/3.1.6/nv22

export LANG=C
export LC_ALL=C
ulimit -s unlimited

cd /apl/qe/7.2-gpu
cd test-suite

make clean
make run-tests
make clean
make run-tests NPROCS=4

```

テスト結果

- pw_metaGGA/metaGGA-spin.in: libxc を組み込んでいないため失敗
- epw 関連: epw を有効にしていなかったため失敗

メモ

- HPC-X を使った場合、UCX が並列対応していないため、ノード間並列に問題。そのため、OpenMPI 3.1.6 を採用
 - (システムの UCX は並列対応)
 - (HPC-X の UCX をリビルドすれば問題が解消する可能性は高い。)

