

## Gromacs 2023.2 with GPU support

### ウェブページ

<http://www.gromacs.org/>

### バージョン

2023.2

### ビルド環境

- GCC 9.2.1 (gcc-toolset-9)
- Open MPI 4.1.5 (CUDA-aware)
- CUDA 12.1 Update 1

### 必要なファイル

- gromacs-2023.2.tar.gz
- regressiontests-2023.2.tar.gz
- fftw-3.3.8.tar.gz

### ビルド手順

```
#!/bin/sh
#PBS -l select=1:ncpus=16:mpiprocs=8:ompthreads=2:ngpus=2
#PBS -l walltime=03:00:00

VERSION=2023.2
INSTALL_PREFIX=/apl/gromacs/${VERSION}-CUDA

BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/Gromacs/${VERSION}/
GROMACS_TARBALL=${BASEDIR}/gromacs-${VERSION}.tar.gz
REGRESSION_TARBALL=${BASEDIR}/regressiontests-${VERSION}.tar.gz
WORKDIR=/gwork/users/${USER}
REGRESSION_PATH=${WORKDIR}/regressiontests-${VERSION}

PARALLEL=12
export LANG=C

FFTW_VER=3.3.8
FFTW_PATH=${BASEDIR}/fftw-${FFTW_VER}.tar.gz

#-----
umask 0022

module -s purge
module -s load gcc-toolset/9
module -s load openmpi/4.1.5/gcc9-cuda12.1u1
module -s load cuda/12.1u1

#export CUDA_VISIBLE_DEVICES=0,1
unset OMP_NUM_THREADS

cd ${WORKDIR}
if [ -d gromacs-${VERSION} ]; then
  mv gromacs-${VERSION} gromacs_erase
  rm -rf gromacs_erase &
fi

if [ -d regressiontests-${VERSION} ]; then
  mv regressiontests-${VERSION} regressiontests_erase
  rm -rf regressiontests_erase &
fi
```

```

tar xzf ${GROMACS_TARBALL}
tar xzf ${REGRESSION_TARBALL}
cd gromacs-${VERSION}

# single precision, no MPI
mkdir rccs-s
cd rccs-s
cmake .. \
  -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
  -DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
  -DCMAKE_C_COMPILER=gcc \
  -DCMAKE_CXX_COMPILER=g++ \
  -DGMX_MPI=OFF \
  -DGMX_GPU=CUDA \
  -DGMX_DOUBLE=OFF \
  -DGMX_THREAD_MPI=ON \
  -DGMX_USE_CUFFTMP=OFF \
  -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
  -DGMX_BUILD_OWN_FFTW_URL=${FFTW_PATH} \
  -DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
  -DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
make -j${PARALLEL} && make check && make install
cd ..

# single precision, with MPI
mkdir rccs-mpi-s
cd rccs-mpi-s
cmake .. \
  -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
  -DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
  -DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \
  -DCMAKE_CXX_COMPILER=mpicxx \
  -DGMX_MPI=ON \
  -DGMX_GPU=CUDA \
  -DGMX_DOUBLE=OFF \
  -DGMX_THREAD_MPI=OFF \
  -DGMX_USE_CUFFTMP=OFF \
  -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
  -DGMX_BUILD_OWN_FFTW_URL=${FFTW_PATH} \
  -DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
  -DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
make -j${PARALLEL} && make check && make install
cd ..

```

## メモ

- (CPU版のメモについてもご確認ください。)
- Open MPI については今回 CUDA-aware 版を使用しています。
- cuFFTMp については今回は回避。PME 逆空間部分を複数 GPU で計算することはできません。
  - NVSHMEM が必要であるものの、NVIDIA HPC SDK にある NVSHMEM では動作させることができません。NVSHMEM を単独で導入する場合はユーザーに提供するに当たってライセンスが問題になると思われるため回避。
- HPC-X 2.11 (CUDA-aware 版)を使った場合に、テストが timeout して失敗するケースを確認(再現確率低)。これまで実行した限りでは通常の Open MPI 4.1.5 を使った場合には問題が置いていないため、こちらを利用。
  - ただ、中々再現しない問題のため、Open MPI 4.1.5 でも問題がある可能性を否定できない。