

VASP GPU平台 计算速度测试

张文帅

USTC SCC

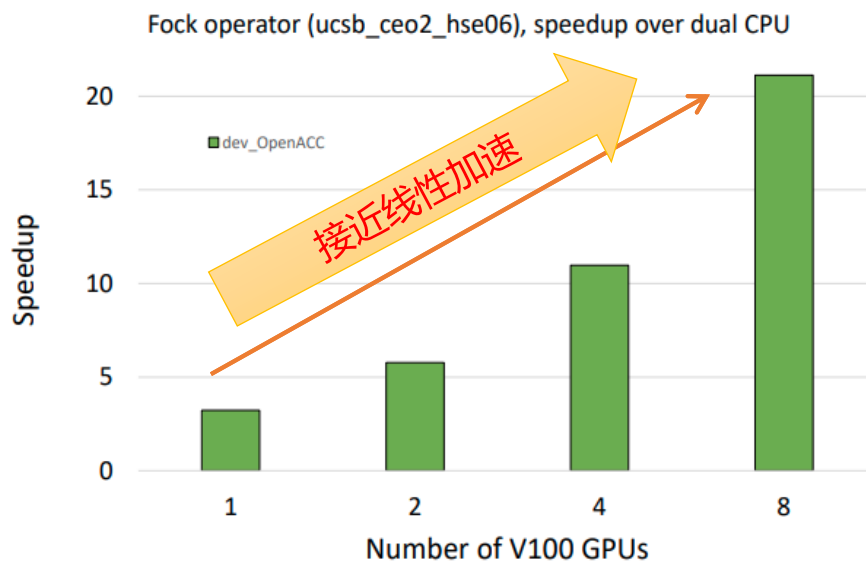
2020-12-16 日 第一版

2021-04-09 日 修订

VASP OpenACC版本 性能加速效果较好 (NVIDIA官方测试)

VASP OPENACC SNEAK PEEK PERFORMANCE

ALGO=All / direct optimization: UCSB_CeO2_HSE06 on V100 SXM2 16GB



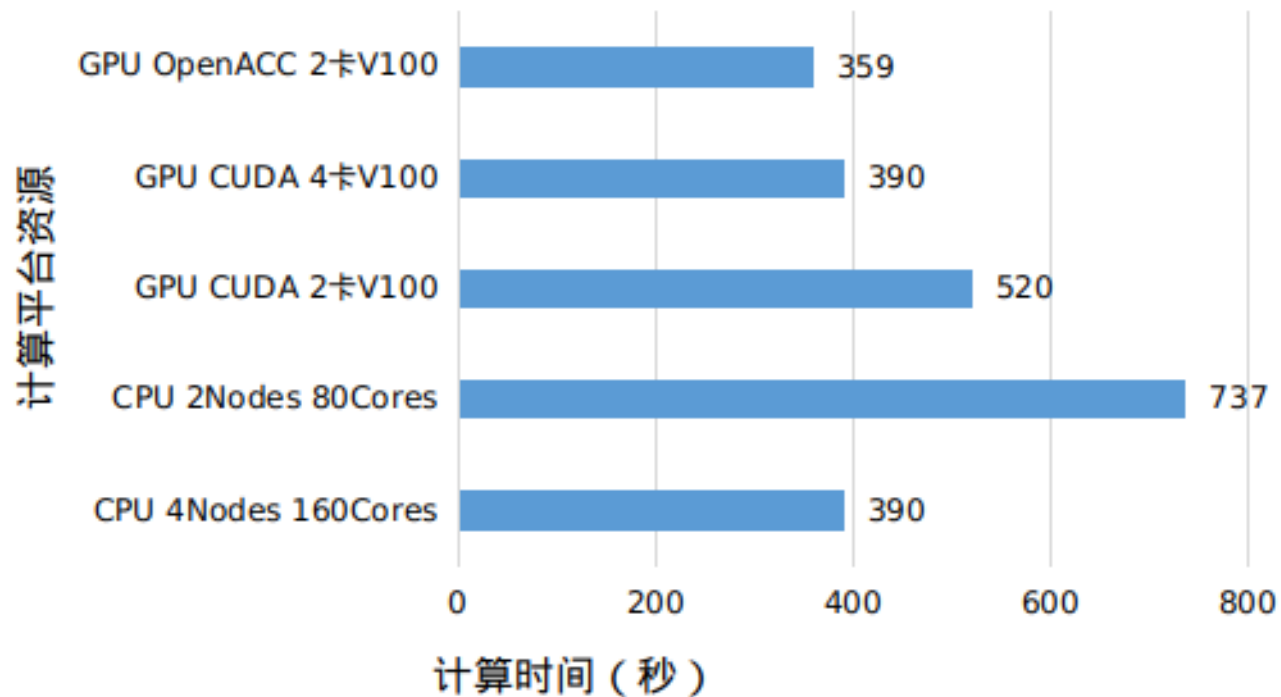
CPU: dual socket Skylake Gold 6140, compiler Intel 2018 Update 4
GPU: dev_OpenACC (PGI 18.7, CUDA 10.0)

- 'tuned' timings for fock_all: OpenACC vs CPU (dev version)
- Using NCCL for double-buffered, asynchronous GPU communication and reduction
- MPS gives only a slight advantage for 1 GPU case
- Measured with a development-snapshot that needs memory transfers before and after fock_all until surrounding routines will be ported

NVIDIA公司的测试表明，对一个HybirdDFT计算，VASP OpenACC 版本在从1卡扩展至8卡时，具有**接近线性的加速效果**，MPS加速效果不大，该版本基于NCCL通信库做Reduction，多卡加速需要NVLink支持。

测试算例1（中大体系）

VASP STD类型计算 CPU vs GPU 测试



结果解析：

- 2卡V100性能好于4节点160核CPU
- 同样使用2卡V100，VASP OpenACC版本的计算速度是VASP CUDA版本的速度的145%

测试算例：

184个原子 C36 H84 S20 Br36 Bi8 体系，NSPIN = 1，4个K点，NGX x NGY x NGZ=140 x140 x140，开启K点并行
(本算例由范逸提供)

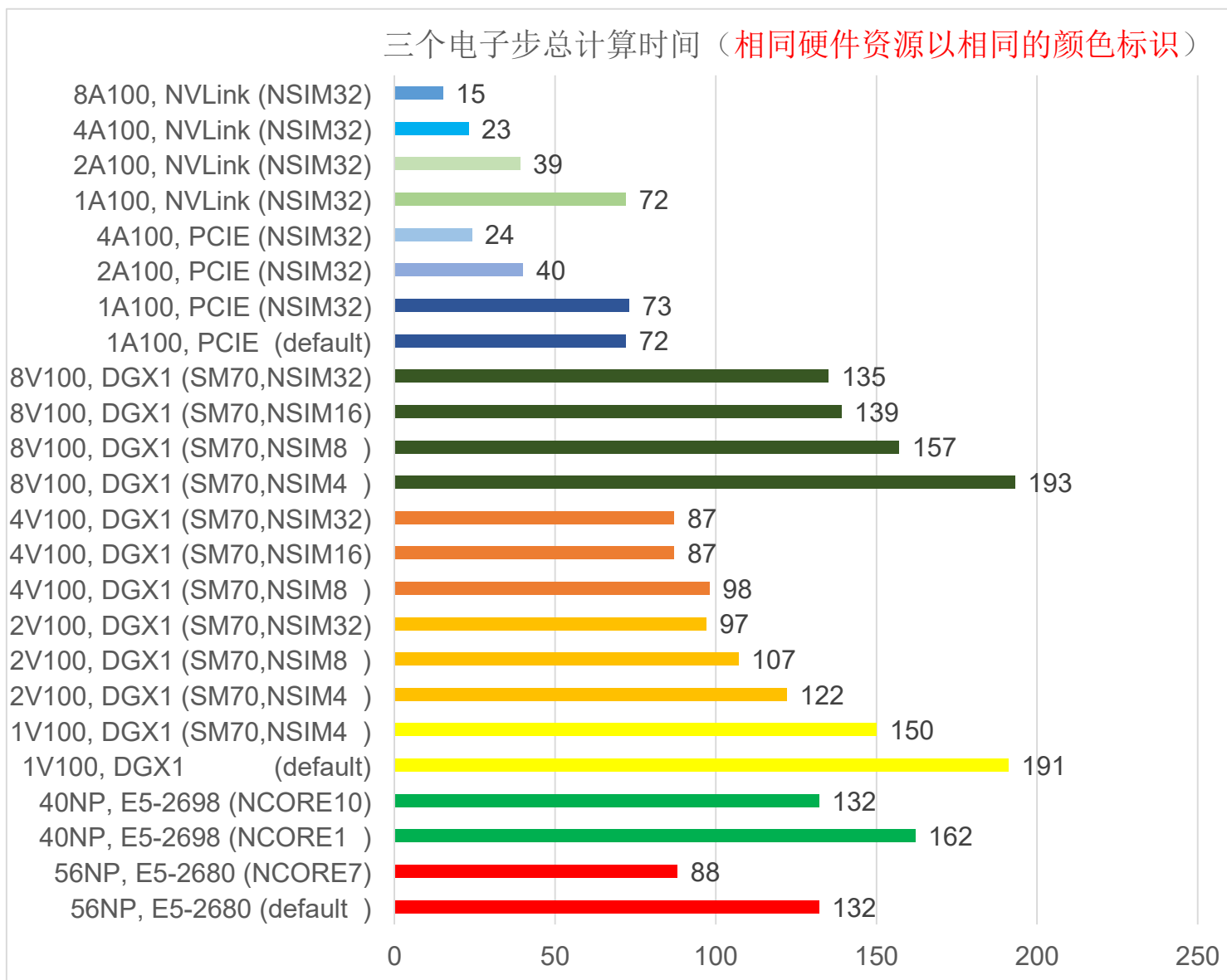
测试CPU节点硬件：

2 x Xeon(R) Gold 6248 20 Core CPU @ 2.50GHz。

测试算例2 (小体系HybirdDFT)

体系 Ni₂₇C₄H₄: NIONS=32 NBANDS=224 ENCUT=380eV LHFCALC=.TRUE.
IALGO=48 NKPT=5。A100平台下的测试均使用OpenACC版本，其他GPU计算使用CUDA版本。

三个电子步总计算时间 (相同硬件资源以相同的颜色标识)



结果解析:

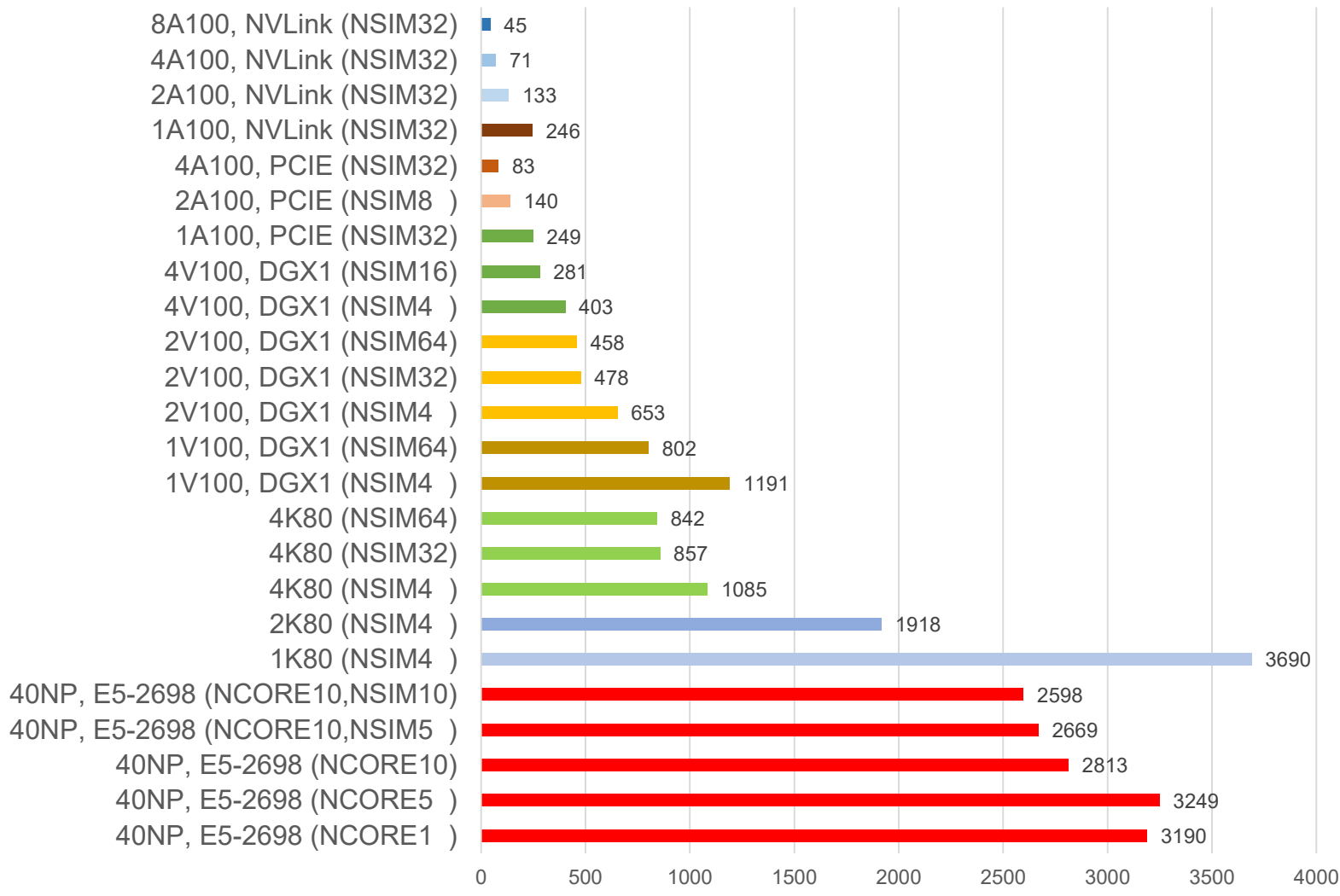
- 相同的硬件资源 (相同颜色条) 下, 使用不同的计算参数, 显著影响计算速度。
- **8卡A100-OpenACC版本**计算时间 (15s) 为 **8卡V100-CUDA版本**计算时间 (135) 的 1/9, 具有**9倍加速效果**。OpenACC版本在 1~4卡A100时具有接近线性的加速效果。
- 因为本算例具有多K点, 在多卡间K点并行效率较高, 所以PCI-E版本的4卡A100计算速度, 与NVLink版本的4卡A100的计算速度接近。
- **默认设置下**: 单卡A100所需计算时间 (72s) 是56个E5-2680计算核心计算时间 (132s) 的 **54%**, 加速**1.83倍**。
- **在优化的GPU/CPU配置下**: 单卡A100所需计算时间 (72s) 是56个E5-2680计算核心计算时间 (88s) 的**82%**, 加速**1.22倍**。

纵轴中, 括号外为硬件资源, 56NP表示使用56进程(核心), 括号内为软件配置, NSIM32表示NSIM参数设置为32

测试算例3 (中体系)

体系 C₁₀₈ N₃ Co : NIONS=112 NBANDS=384eV NELECT=456 ENCUT=400 LHFALC=.TRUE. IALGO=38 NKPT=2。A100平台下的测试均使用OpenACC版本，其他GPU计算使用CUDA版本。

三个电子步总计算时间 (相同硬件资源以相同的颜色标识)



结果解析：

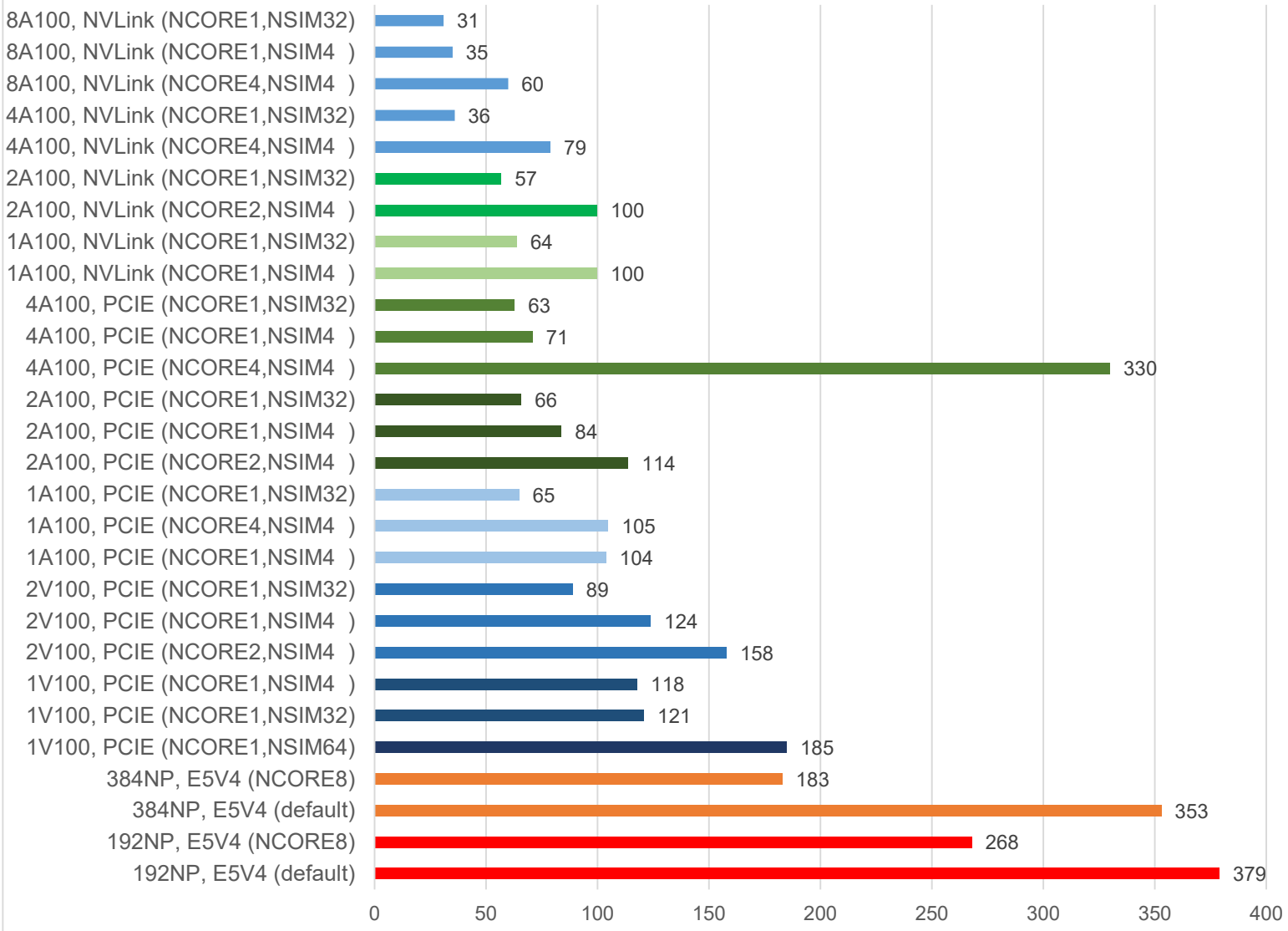
- 相同的硬件资源 (相同颜色条) 下，使用不同的计算参数，显著影响计算速度。
- 8卡A100-NVLink OpenACC版本测试下4卡到8卡的并行效率较好(79%)，计算时间由71s降为45s，仍具有接近线性的加速效果。
- 单卡A100-OpenACC版本计算时间 (246s) 是单卡V100-CUDA版本计算时间 (802s) 的 30%，速度相差3.3倍
- 因为本算例K点较少，通信要求高，所以PCI-E版本的4卡A100计算时间 (83s)，与NVLink版本的4卡A100的计算时间 (71) 有可见差异。
- 该算例下，CPU计算时运行参数优化效果较差，1个A100 GPU，相比40个 E5-2698 CPU 核心，具有10.5倍加速。

纵轴中，括号外为硬件资源，40NP表示使用40进程(核心)，括号内为软件配置，NSIM32表示NSIM参数设置为32

测试算例4 (大体系)

体系 Zr₂₁₆N₂₁₆Cl₁₉₈ : NIONS=630 NBANDS=3045 NELECT=5058
ENCUT=400eV LHFCALC=.FALSE. IALGO = 38 NKPT=1。在A100与V100平台的测试均使用OpenACC版本

五个电子步总计算时间 (相同硬件资源以相同的颜色标识)



结果解析:

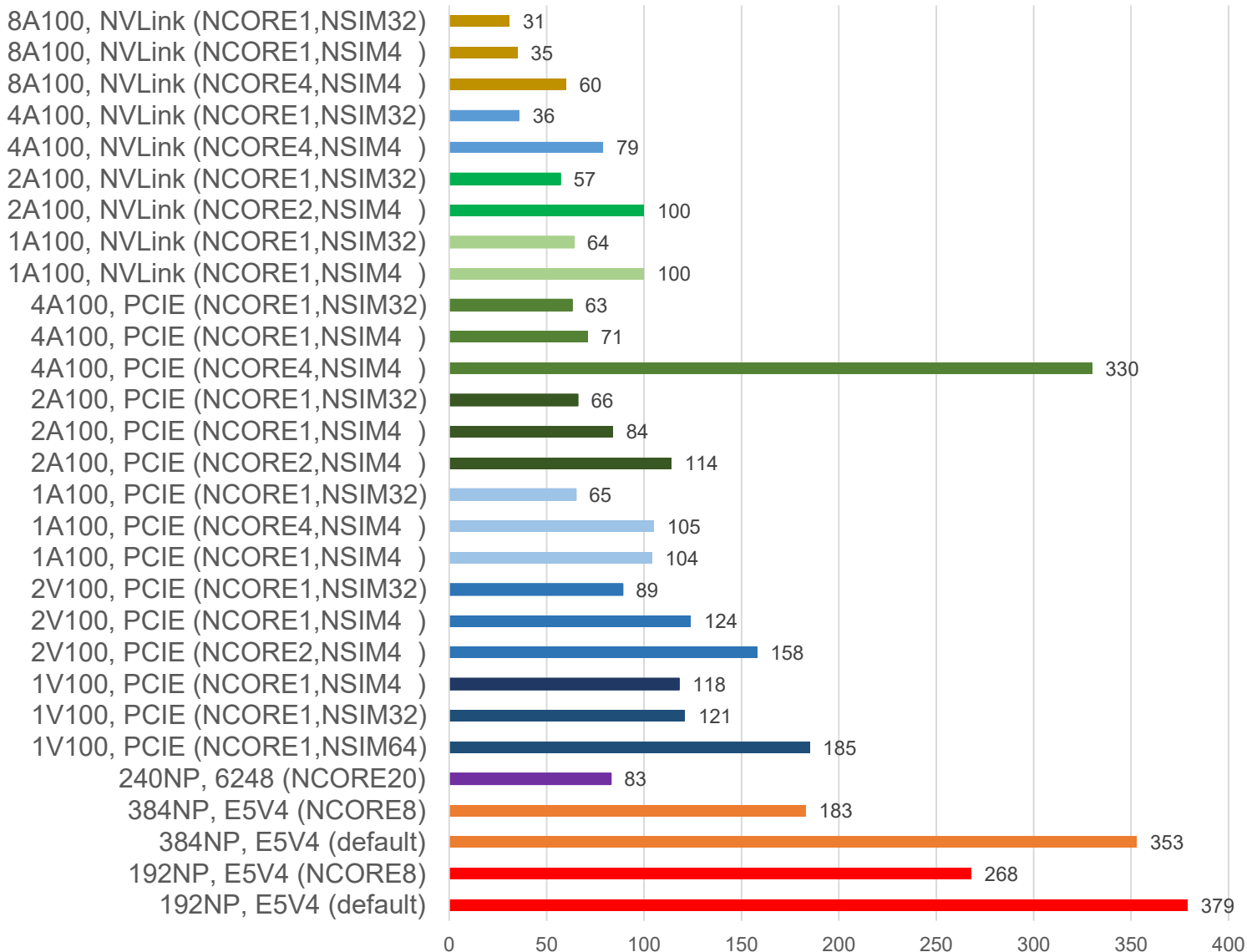
- 相同的硬件资源 (相同颜色条) 下, 使用不同的计算参数, 显著影响计算速度。
- 单卡A100计算时间 (64s) 是单卡V100 (118s) 的 54%, 速度相差近2倍。
- 因为本算例只有一个K点, 多卡间通讯较多, 所以在NVLink版本的4卡A100下的计算 (36s), 相比PCI-E版本4卡A100下计算 (63s), 具有1.75倍加速, NVLink效果明显。
- 该算例下, CPU计算时运行参数优化效果较好 (353s -> 183s), 且从192扩展为398核心时具有并行效率73%。即便如此, 1个A100 GPU下的计算时间为64s, 384个 E5V4 CPU 核心下的计算时间为183s, 前者的速度是后者的2.86倍。

纵轴中, 括号外为硬件资源, 384NP表示使用384进程(核心), 括号内为软件配置, NSIM32表示NSIM参数设置为32

测试算例4 (大体系)

体系 $Zr_{216} N_{216} Cl_{198}$: NIONS=630 NBANDS=3045 NELECT=5058
ENCUT=400eV LHFCALC=.FALSE. IALGO = 38 NKPT=1。在A100与V100平台的测试均使用OpenACC版本

电子步总计算时间 (相同硬件资源以相同的颜色标识)



纵轴中, 括号外为硬件资源, 384NP表示使用384进程(核心), 括号内为软件配置, NSIM32表示NSIM参数设置为32

结果解析:

- 相同的硬件资源 (相同颜色条) 下, 使用不同的计算参数, 显著影响计算速度。
- 单卡A100计算时间 (64s) 是单卡V100 (118s) 的 54%, 速度相差近2倍。
- 因为本算例只有一个K点, 多卡间通讯较多, 所以在NVLink版本的4卡A100下的计算 (36s), 相比PCI-E版本4卡A100下计算 (63s), 具有1.75倍加速, NVLink效果明显。
- 该算例下, CPU计算时运行参数优化效果较好 (353s -> 183s), 且从192扩展为398核心时具有并行效率73%。即便如此, 1个A100 GPU下的计算时间为64s, 384个 E5V4 CPU 核心下的计算时间为183s, 前者的速度是后者的2.86倍。
- 比较CPU与OpenACC版本下两次计算的收敛总能量, 其值分别为 -4949.26104788 eV 与 -4949.26105981 eV, 其差异约为 $1.2E-5$ eV, 为正常的数值精度误差。

总结

- VASP 6.1 OpenACC 版本通过更全面的代码GPU化，使其相对CUDA版本具有1.5 ~ 2 倍的性能加速，全面提升了GPU利用效率。
- 新的OpenACC 版本不仅在Hybird DFT计算中相对同代 CPU 保持速度与性价比优势，在用户计算占比更大的标准DFT计算中也具有较好的加速与性价比。
- 在目前有限的计算测试中，没有发现OpenACC版本在计算结果上有数值精度问题。