

Les logiciels de chimie sur machines parallèles

Fabien Leydier

26 juin 2014

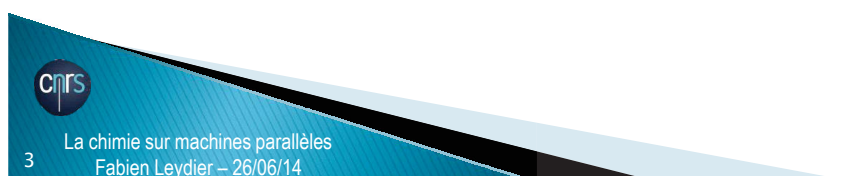


Sommaire de la journée

- ▶ Présentation de l'IDRIS
- ▶ Présentation de la Maison de la Simulation
- ▶ Présentation du nœud CECAM Ile-de-France
- ▶ Parallélisme : de la Machine à la Chimie
 - Aspects matériels
 - Aspect théorique du parallélisme
 - Aspects applicatifs
- ▶ Les logiciels de chimie
 - Description des possibilités (propriétés, utilisation, etc.)
 - Conseils sur l'utilisation des logiciels
 - Illustrations des concepts théoriques du parallélisme

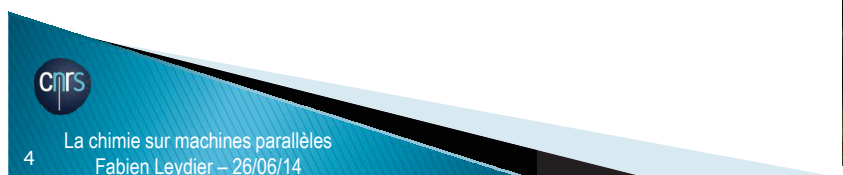
Objectifs de la présentation

- ▶ Donner une vision d'ensemble des logiciels de chimie
 - Nombreuses possibilités offertes par TOUS les logiciels
 - Utilisation par habitude... (ici, pas de jugement subjectif !)
- ▶ Utiliser les logiciels de chimie sur une machine parallèle
 - Ils sont TOUS parallèles (plus ou moins...)
 - Ils comportent souvent des options spécifiques (parfois « oubliées » car peu ou mal documentées...)
 - La plupart donnent des informations sur la parallélisation (bien souvent négligées...)
- ▶ Présentation non exhaustive (malheureusement)
 - Mais divers conseils pratiques



L'IDRIS en deux mots

- ▶ *Institut de Développement et des Ressources en Informatique Scientifique*
- ▶ Unité propre de service du CNRS (UPS 851), fondée fin 1993
- ▶ Centre de calcul équipé de supercalculateurs parmi les plus puissants du moment
 - Centre d'excellence dans le domaine du Calcul de Haute Performance (HPC)
 - Puissance pétaflopique depuis janvier 2013
 - Équipements financés par GENCI depuis 2012
 - Grand Équipement National de Calcul Intensif
 - Effectue la gestion et l'attribution des heures sur les machines

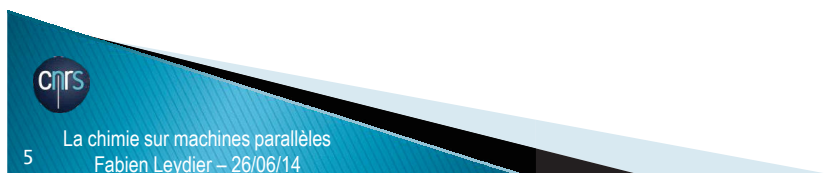


Calculer à l'IDRIS

Comment obtenir des heures de calcul ?

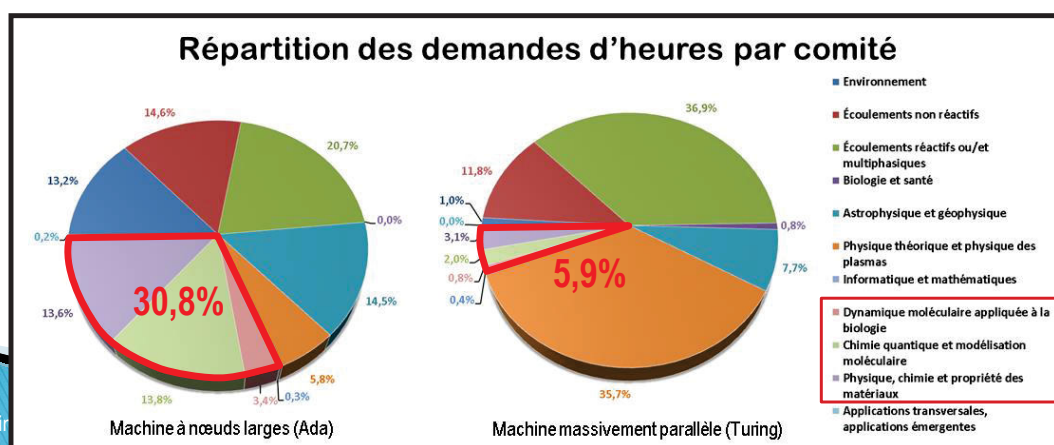
► www.edari.fr

- **2 sessions d'attribution par an (octobre – avril)**
 - Constitution d'un dossier décrivant le projet scientifique
 - Analyse des demandes par les Comités thématiques
- **Demande au « fil de l'eau »**
 - Pour compléter la demande en cours d'année
 - Limitée à 10 % de l'allocation initiale
- **Accès préparatoire**
 - Compte de test, en vue éventuellement d'une demande ultérieure
 - Allocation forfaitaire : 15000 heures sur Ada, 50000 heures sur Turing



Comités Thématiques liés à la chimie

- **CT 7 : Dynamique moléculaire appliquée à la biologie**
 - Marc Baaden
 - baaden@smplinux.de
- **CT 8 : Chimie quantique et modélisation moléculaire**
 - Marie-Bernadette Lepetit
 - marie-bernadette.lepetit@grenoble.cnrs.fr
- **CT 9 : Physique, chimie et propriétés des matériaux**
 - Alain Pasturel
 - alain.pasturel@grenoble.cnrs.fr



Maison de la Simulation



- ▶ Laboratoire regroupant 5 partenaires
 - CEA, CNRS, INRIA, Université d'Orsay et Université de Versailles – St Quentin
- ▶ Objectif : accompagner, soutenir et stimuler les communautés scientifiques afin de tirer le meilleur parti des supercalculateurs
 - Centre de recherche pluridisciplinaire autour de la simulation numérique
 - Unité de service et d'expertise ouverte sur les communautés
 - Pôle d'enseignement et d'animation scientifique en calcul intensif

<http://www.maisondelasimulation.fr>



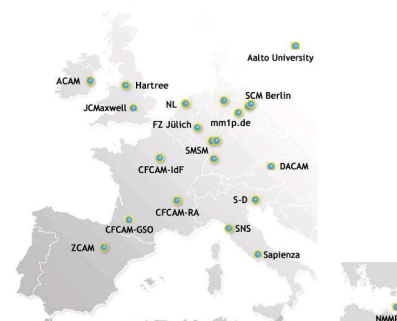
La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

7

Nœud CECAM Ile-de-France



- ▶ CECAM
 - Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire
 - Créé en 1969
 - Organisé en 17 nœuds en Europe
 - Organisation dédiée à la promotion de la recherche fondamentale sur les méthodes de calcul avancées et leurs applications
 - Acteurs de la recherche académique et industrielle
 - Pluridisciplinaire
 - Matériaux pour le secteur de l'énergie
 - Modélisation biomoléculaire
 - Organisation de *workshops* et de tutoriaux



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

8

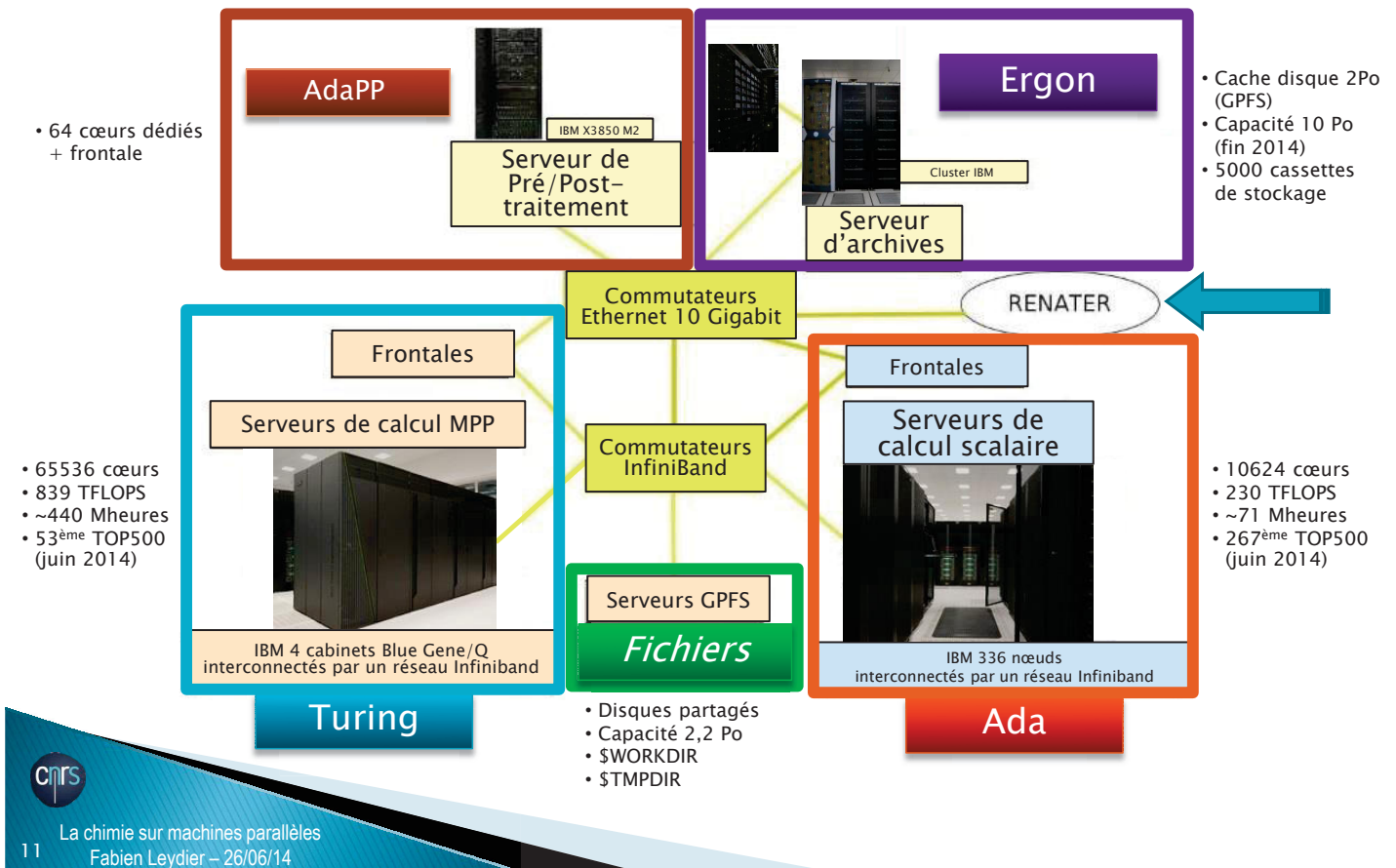
http://www.cecarn.org/node_cfcarn_idf.html

Le Parallélisme : De la Machine à la Chimie

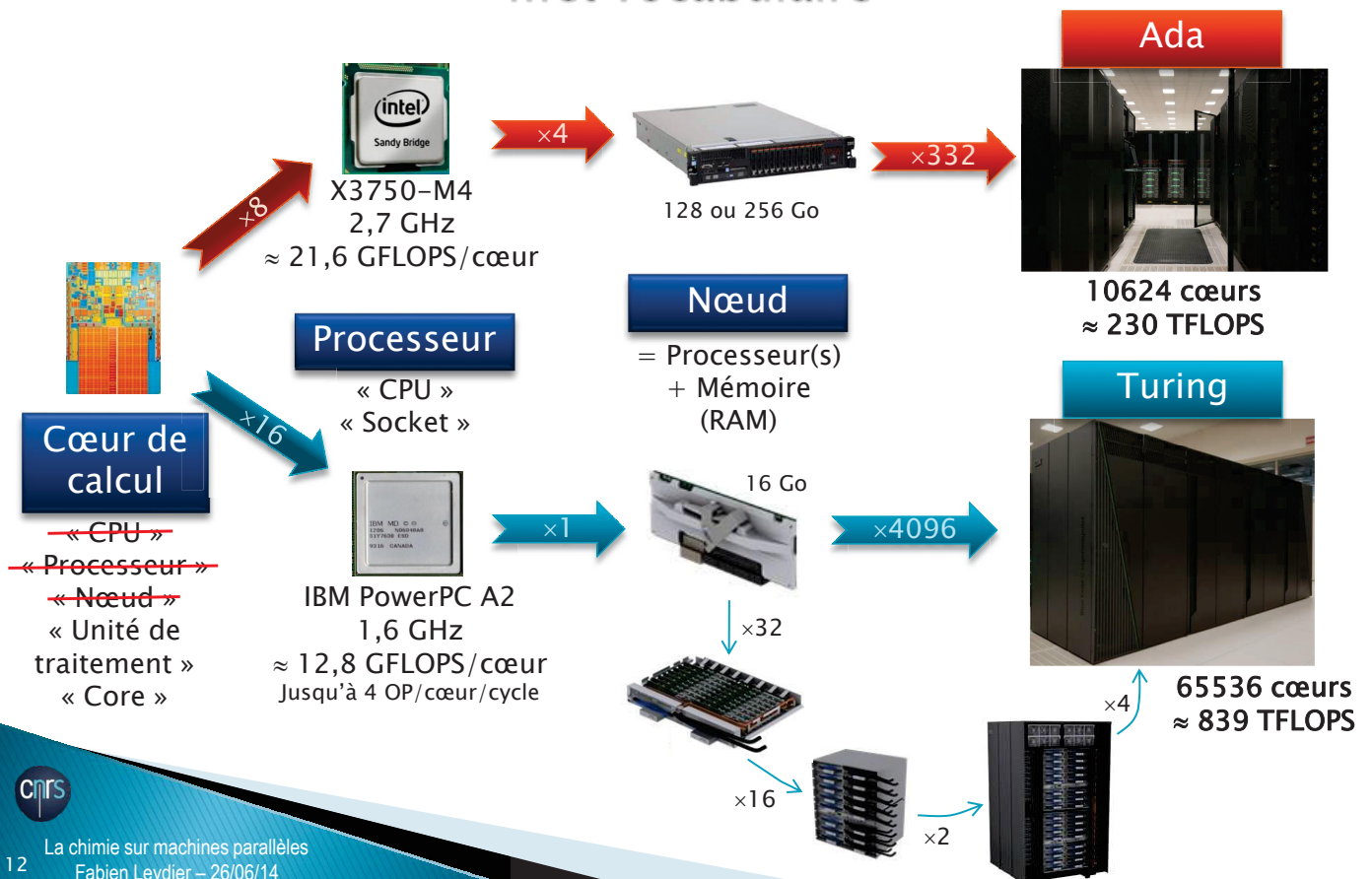
- Aspects matériels
- Aspects théoriques du parallélisme
- Aspects applicatifs
- Bilan

Aspects matériels

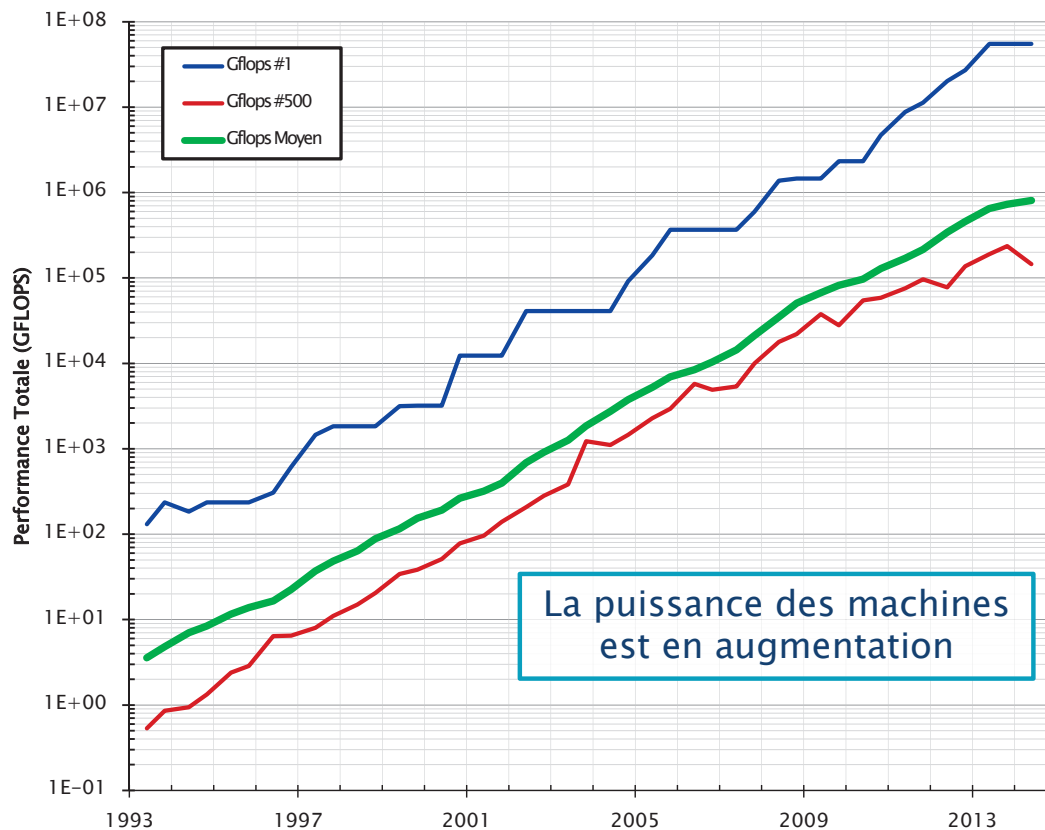
Machines de l'IDRIS



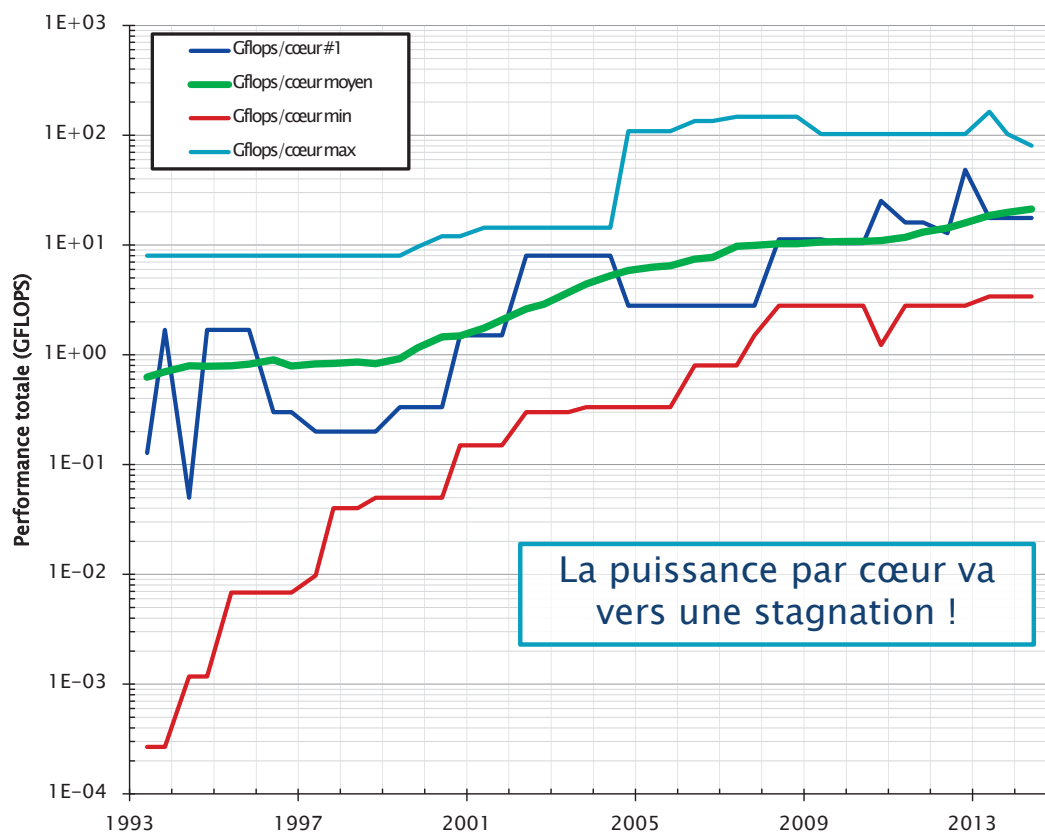
Architecture des machines de calcul... ...et vocabulaire



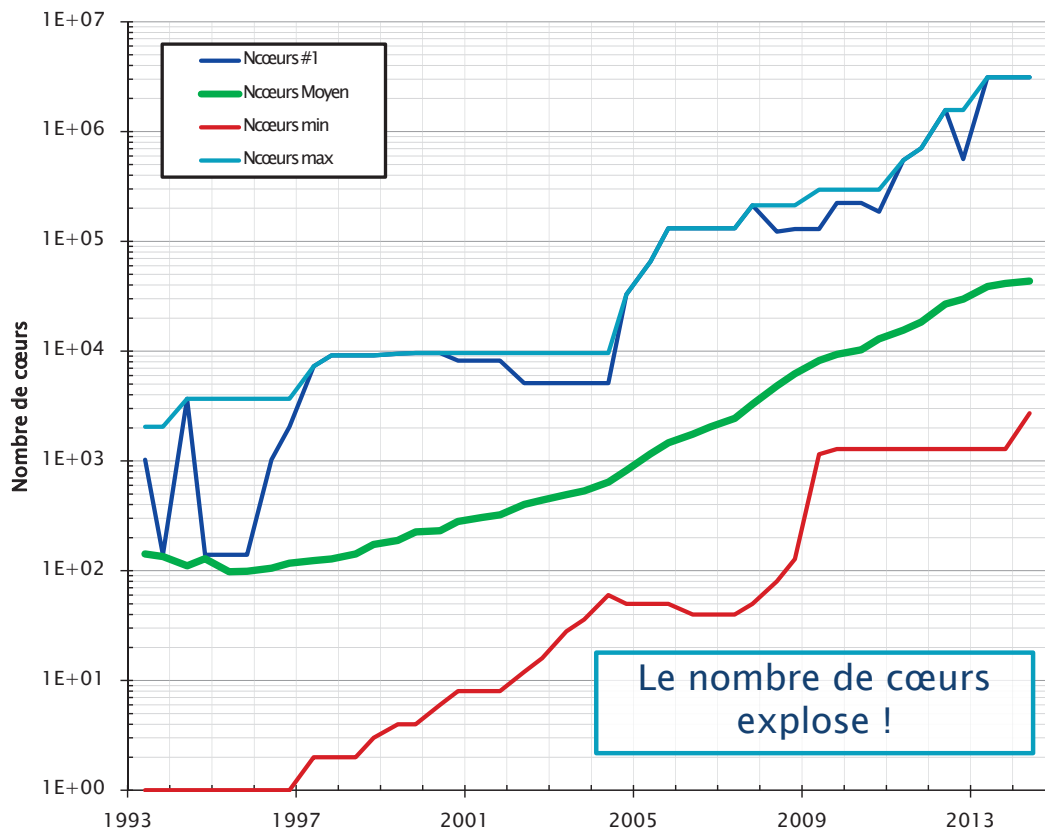
Le parallélisme : origine et problématique



Le parallélisme : origine et problématique



Le parallélisme : origine et problématique



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

15

Evolution des machines à l'IDRIS

40 960 cœurs
139 TFLOPS
≈ 3,4 GFLOPS/cœur
4 cœurs par puce



Babel
(Blue Gene/P)

2008

3 584 cœurs
67 TFLOPS
≈ 18,8 GFLOPS/cœur
2 cœurs par puce



Vargas
(IBM Power 6)

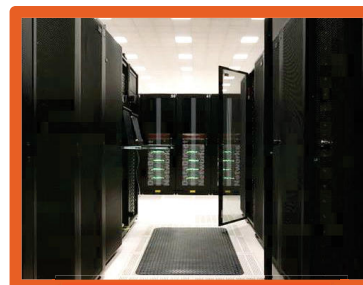
65 536 cœurs
839 TFLOPS
≈ 12,8 GFLOPS/cœur
16 cœurs par puce
53^{ème} au TOP500
(juin 2014)



Turing
(Blue Gene/Q)

2013

10 624 cœurs
230 TFLOPS
≈ 21,6 GFLOPS/cœur
8 cœurs par puce
267^{ème} au TOP500
(juin 2014)



Ada
(Intel x3750)



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

16

Le parallélisme : origine et problématique

► Evolution des processeurs

- La puissance par cœur évolue faiblement (plafonnement de la fréquence, etc.)
⇒ **Solution : augmenter le nombre de cœurs**

► Mémoire

- Augmentation rapide du nombre de cœurs
⇒ **La mémoire par cœur stagne, voire diminue**

► Codes séquentiels (pas seulement la chimie...)

- Il ne suffit plus d'attendre l'évolution de la puissance des cœurs pour calculer plus vite
- Paralléliser un code séquentiel ?
 - Non pensé pour le parallélisme à l'origine
 - Demande une réécriture en grande partie (voire complète)
 - Demande énormément de ressources (temps, compétences)
 - Aucune garantie absolue sur les performances parallèles

Aspects théoriques du parallélisme

Théorie du parallélisme

► Loi d'Amdahl

- Énoncée par Gene Amdahl en 1967
- Exprime le gain théorique de performance qu'on peut attendre d'un programme en améliorant une composante de sa performance
- **L'accélération parallèle** est le rapport entre le temps d'exécution d'un travail en **séquentiel** et le temps d'exécution du **même** travail en **parallèle**
 - Temps d'exécution = temps *elapsed*, c'est-à-dire le temps total, le temps de restitution
- Formule :

$$Acc(n) = \frac{t_{elapsed\ séquentiel}}{t_{elapsed\ parallèle}(n)} = \frac{1}{\alpha + \frac{1-\alpha}{n}} < \frac{1}{\alpha}$$

Avec n : nombre de cœurs

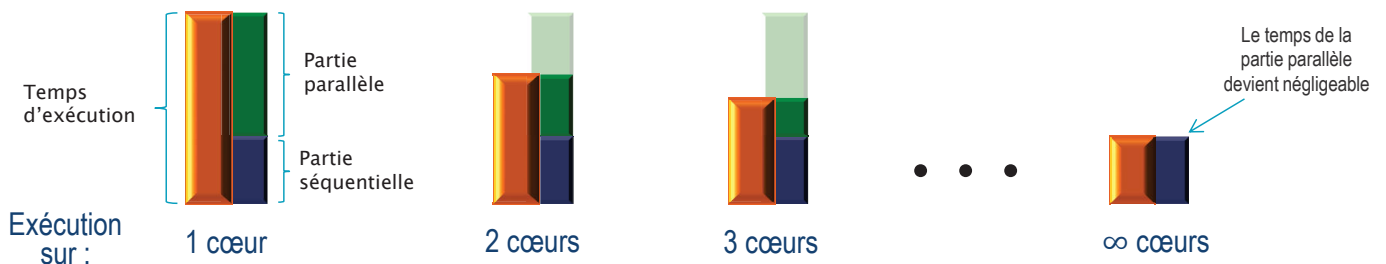
α : proportion de code séquentiel du programme



Théorie du parallélisme

► Loi d'Amdahl

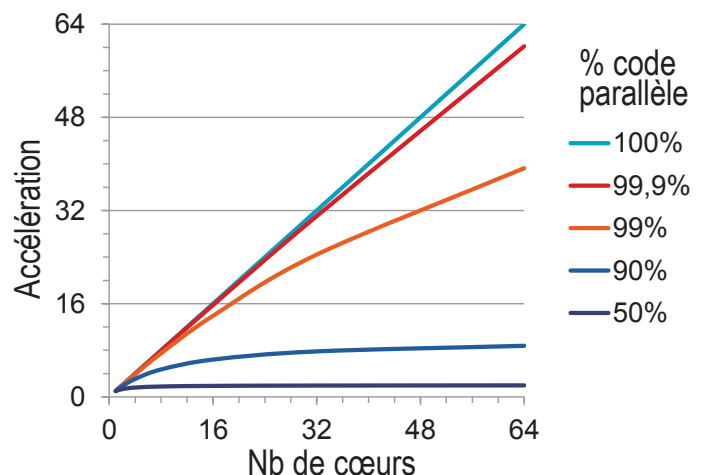
◦ Illustration



⇒ **Conclusion extrêmement pessimiste!**

⇒ **Strong scaling**

⇒ **La taille du problème est fixe**



Théorie du parallélisme

► Loi de Gustafson-Barsis

- Énoncée par John L. Gustafson et Edwin H. Barsis en 1988
- Loi d'Amdahl pessimiste
 - Considérer une charge de travail fonction du nombre de cœurs de calcul, plutôt qu'une charge fixe indépendante de ce nombre
 - Formule :

$$Acc(n) = n - \alpha \cdot (n - 1)$$

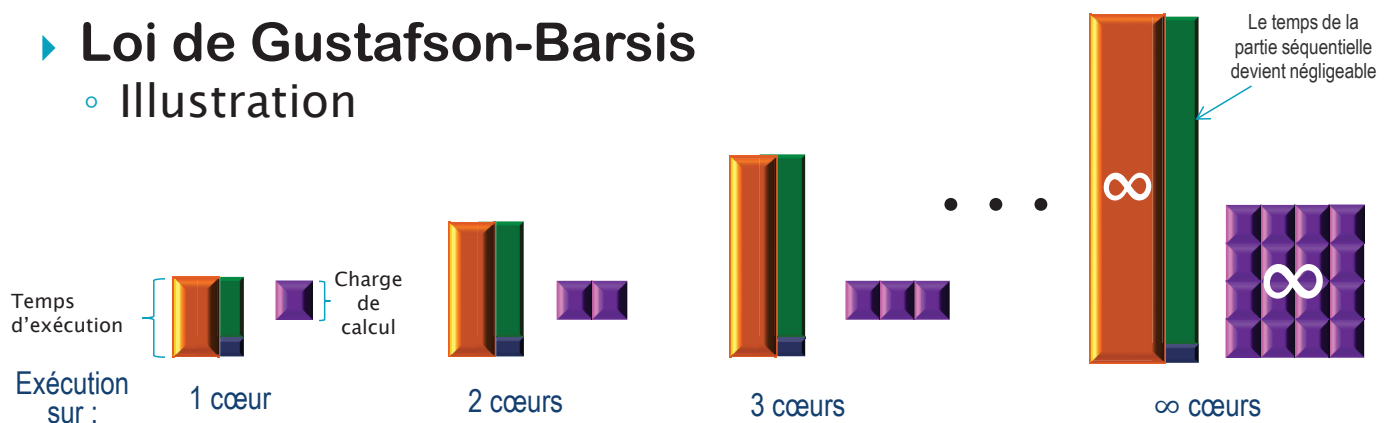
Avec n : nombre de cœurs

α : proportion de code séquentiel du programme

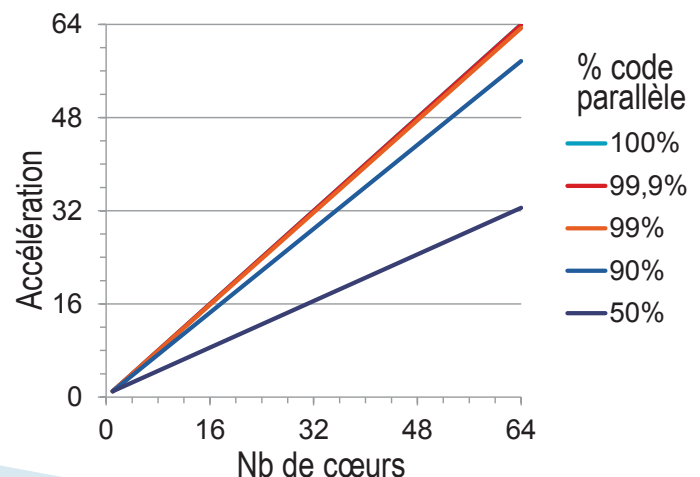
Théorie du parallélisme

► Loi de Gustafson-Barsis

◦ Illustration



⇒ **Conclusion optimiste !**
⇒ **Weak scaling**
⇒ **La taille du problème augmente**
⇒ **Parfois difficile à réaliser en pratique**



Exemples d'erreurs « classiques »

```
General routines
calbec : 8.36s CPU 8.47s WALL ( 3739 calls)
fft : 0.21s CPU 0.28s WALL ( 156 calls)
fftw : 376.22s CPU 377.15s WALL ( 502468 calls)
davicio : 0.52s CPU 25.59s WALL ( 3190 calls)

Parallel routines
fft_scatter : 112.92s CPU 111.18s WALL ( 502624 calls)
PWSCF : 8m36.30s CPU 9m 9.20s WALL

This run was terminated on: 13:16:46 7Mar2014

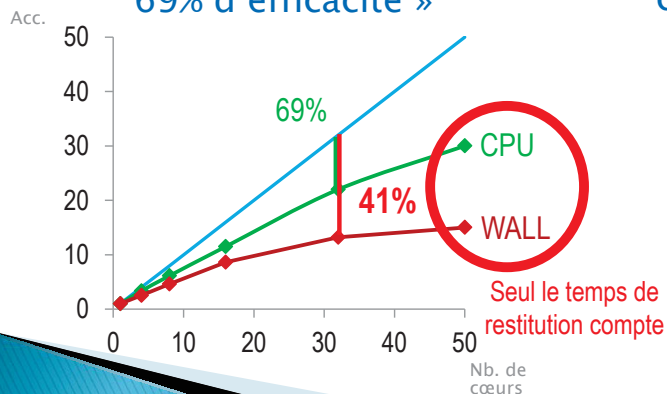
JOB DONE.
```

mesures de
temps par
le logiciel

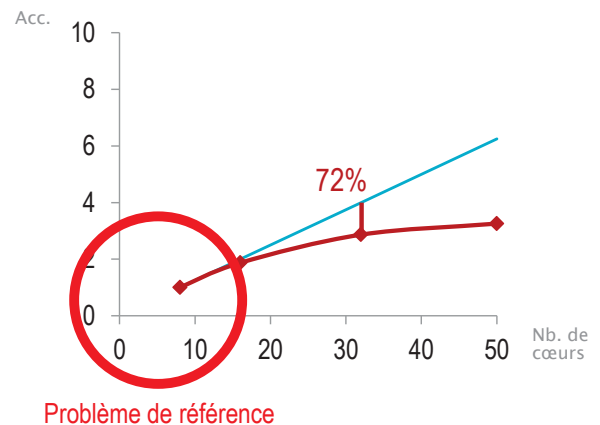
Efficacité parallèle

$$Eff(n) = \frac{Acc(n)}{n}$$

« Sur 32 cœurs, j'obtiens
69% d'efficacité »



« Avec le temps *elapsed*, sur 32
cœurs, j'obtiens 72% d'efficacité »

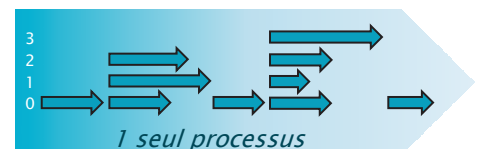


Types de parallélisation

► OpenMP

◦ Open Multi-Processing : « multi-tâches »

- Mémoire partagée sur un nœud
 - Programme répartissant le calcul entre des *threads* (ou tâches, processus légers, etc.)
 - 1 *thread* : portion du calcul attribuée à 1 cœur
 - Chaque *thread* a accès à toute la mémoire allouée au programme
- 1 seul processus lancé
 - Programmation voisine d'un code séquentiel
 - Un programme peut être « facilement » parallélisable
 - Voire même automatiquement (compilateurs)
- Programme exécutable en intra-nœud seulement
 - Echanges directement dans la mémoire du nœud
 - Extensibilité limitée au nombre de cœurs composant un nœud



Types de parallélisation

► MPI

◦ Message-Passing Interface : « Passage de messages »

- Echange d'informations entre des processus MPI (ou « tâches MPI »)

- Plusieurs processus lancés simultanément

- Processus MPI : code exécuté sur 1 cœur + mémoire associée
- Nécessite une programmation explicite, très spécifique
- Chaque processus ne fait pas forcément le même calcul

Plusieurs
processus en
parallèle

- Programme exécutable en intra- et extra-nœud

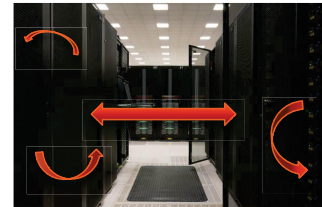
- Processus intra-nœud

- Echanges dans la mémoire du nœud



- Processus extra-nœud

- Echanges à travers un réseau très haute performance



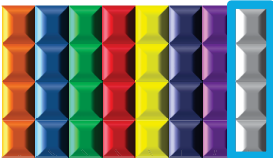
Types de parallélisation

► Hybride MPI-OpenMP

◦ Combiner les deux concepts

MPI :  1 processus / cœur, plusieurs processus simultanés

OpenMP :  1 thread / cœur
1 seul processus

Hybride :  1 processus MPI = plusieurs threads OpenMP
= plusieurs cœurs

Processus MPI multiples

But : obtenir une parallélisation plus efficace, adaptée à l'architecture des machines

→ Avantage : extensibilité potentiellement accrue

→ Inconvénient : programmation hybride délicate

Aspects applicatifs

Parallélisme dans la chimie quantique

Découpage du système	Fonction d'onde et densité e^-	Fonctions mathématiques
• Multiples images (NEB, ...) • Points k	• Coefficients de la base de projection (vecteurs d'onde, gaussiennes, etc.) • Bandes, calcul de la densité	• Fonctions (FFT, etc.) • Solveurs de valeurs propres • Manipulation de matrices

- **Découpage du système**
 - Calcul d'éléments unitaires pour une simulation
 - Répartition des calculs unitaires en parallèle = très efficace
- **Fonction d'onde**
 - Cœur du calcul
 - Nombre de données à traiter parfois énorme
- **Fonctions mathématiques**
 - Reposent souvent sur des bibliothèques spécialisées
 - Génèrent beaucoup de communications (car beaucoup de données à traiter)

Parallélisme dans la chimie quantique

Découpage du système	Fonction d'onde et densité e^-	Fonctions mathématiques
• Multiples images (NEB, ...) • Points k	• Coefficients de la base de projection (vecteurs d'onde, gaussiennes, etc.) • Bandes, calcul de la densité	• Fonctions (FFT, etc.) • Solveurs de valeurs propres • Manipulation de matrices

Complexité du parallélisme

- Parallélisme de plus en plus complexe à optimiser
 - Algorithmes de symétrie
 - Réduction de la taille effective du système
 - But : aller vers des calculs de fonctions intrinsèquement parallèles
 - « Fonction d'onde et densité » → « Fonctions mathématiques »



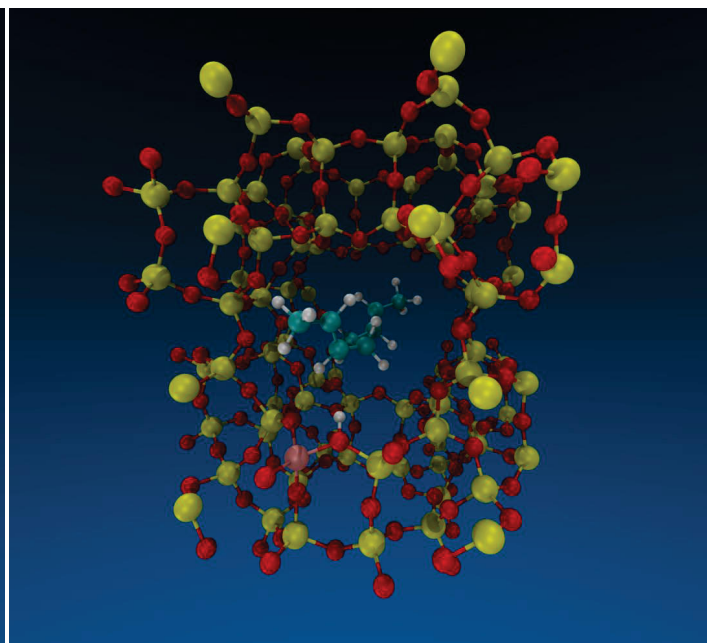
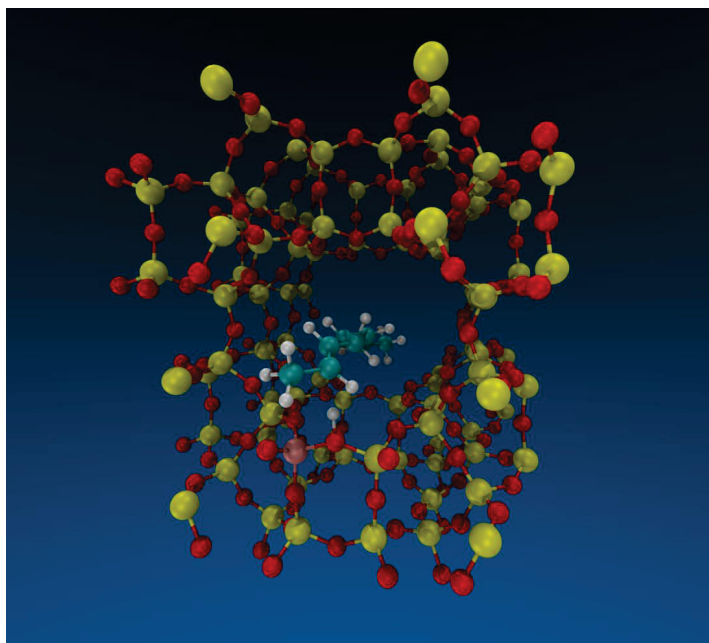
La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

29

Que peut m'apporter le parallélisme ?

► Durée d'une simulation plus importante

H-MOR + 2,6-hexdiène (311 atomes), PBE, 30 Ry, Γ , dynamique BO @ 600K, $\Delta t = 0,7$ fs, 20h de calcul, CPMD



4 cœurs
16 pas

33,8 jours

Temps de
restitution
pour 648 pas

0,8 jour

512 cœurs
648 pas

3245 heures

Temps
« facturé »

4915 heures



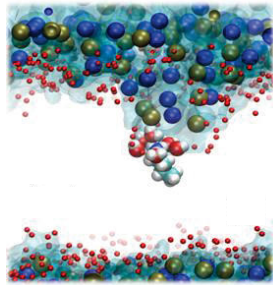
La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

30

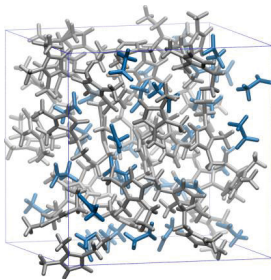
Que peut m'apporter le parallélisme ?

► Traitement d'un système de taille importante

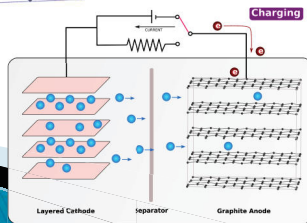
- Simulations « Grands challenges » réalisées à l'IDRIS



- Étude de transferts d'acides aminés au travers de membranes biologiques (lysines hydratées)
- 15000 atomes
- Code GROMACS sur Ada
- D. Bonhenry, F. Dehez, M. Tarek



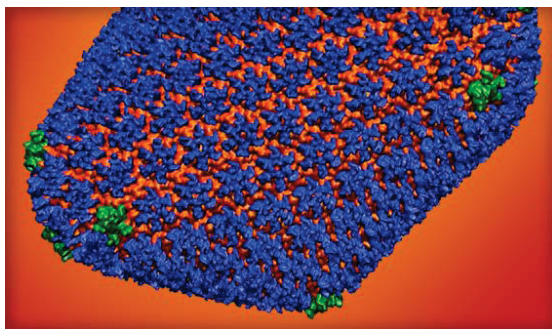
- Simulation d'un liquide ionique
- 900 - 10000 atomes
- Codes CP2K et CPMD sur Ada
- N. Sieffert



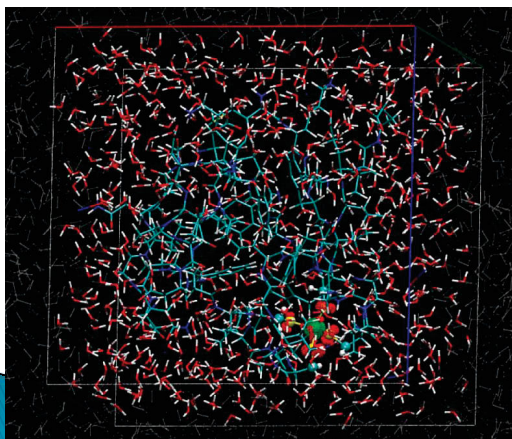
- Modélisation des matériaux d'anodes pour batteries ion-lithium
- 208 - 625 atomes
- Code BigDFT sur Turing
- S. Krishnan, D. Caliste, T. Deutsch, L. Genovese, P. Pochet

Que peut m'apporter le parallélisme ?

► Traitement d'un système de taille importante



- Capsule entière du virus VIH, assemblage de plus de 1300 protéines modélisées à l'échelle atomique
- 64,4 millions d'atomes
- Code NAMD, 128000 cœurs sur Blue Waters (National Center for Supercomputing Applications, Université de l'Illinois), Cray XE, 11,5 PFLOPS
- K. Schulten, J. R. Perilla, P. Zhang *et al.*, *Nature*, 497, 2013, 643.



- Protéine de rubredoxine hydratée (B3LYP + base triple- ζ polarisée)
- 2825 atomes (26,7 nm³)
- Code CP2K, 8196 cœurs sur Jaguar (Oak Ridge National Laboratory), Cray XT5, 1,75 PFLOPS
- M. Guidon, J. Hutter, J. VandeVondele, *J. Chem. Theory, Comput.*, 5, 2009, 3010.

Bilan

Attraits et limites du parallélisme

► Augmenter le nombre de cœurs

- Permet de diminuer le temps de restitution du calcul
- Permet de traiter un système de taille plus importante (plus de mémoire)
- **Mais...**
 - **L'extensibilité n'est pas infinie par définition**
 - Lois d'Amdahl et de Gustafson-Barsis
 - La proportion de communications (échanges de données entre les processus) devient non négligeable devant le temps consacré aux calculs
 - Aucun code n'est parallèle à 100%
 - **Une fois le système découpé en ses plus petits éléments, il n'y a plus rien à partager**
 - Des cœurs n'ont aucune charge de calcul (mauvais équilibrage de charge)
 - Le temps de restitution ne diminue pas de façon linéaire...et peut même augmenter !

Attraits et limites du parallélisme

► Augmenter la taille du système

- Permet d'utiliser plus efficacement le parallélisme
 - Proportion moindre de communications, meilleure répartition en mémoire, etc.
- Permet de nouvelles études
 - Effets de sites, de solvant, de défauts, etc.
- **Mais...**
 - Parfois impossible sur un système moléculaire donné
 - Peu d'intérêt à obtenir n fois le même résultat
 - Le temps de restitution sera plus important à nombre de cœurs constant
 - Avec plus de cœurs, la « facture temps » augmente d'autant plus

Conclusion

► La parallélisation est essentielle aujourd'hui

- Architecture des machines
- Taille des simulations de plus en plus importante

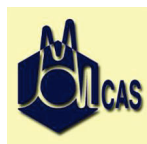
► L'extensibilité est la clé pour les performances

- Dépend de la programmation du code en lui-même
- Dépend de la taille et de la complexité du système étudié
- Il y a parfois un surcoût en heures
 - Pour obtenir un résultat plus rapidement
 - Pour que son système tienne dans la mémoire de la machine

Les logiciels installés à l'IDRIS



abinit.



siesta



NAMD
Scalable Molecular Dynamics

GROMACS
FAST. FLEXIBLE. FREE.



ADF

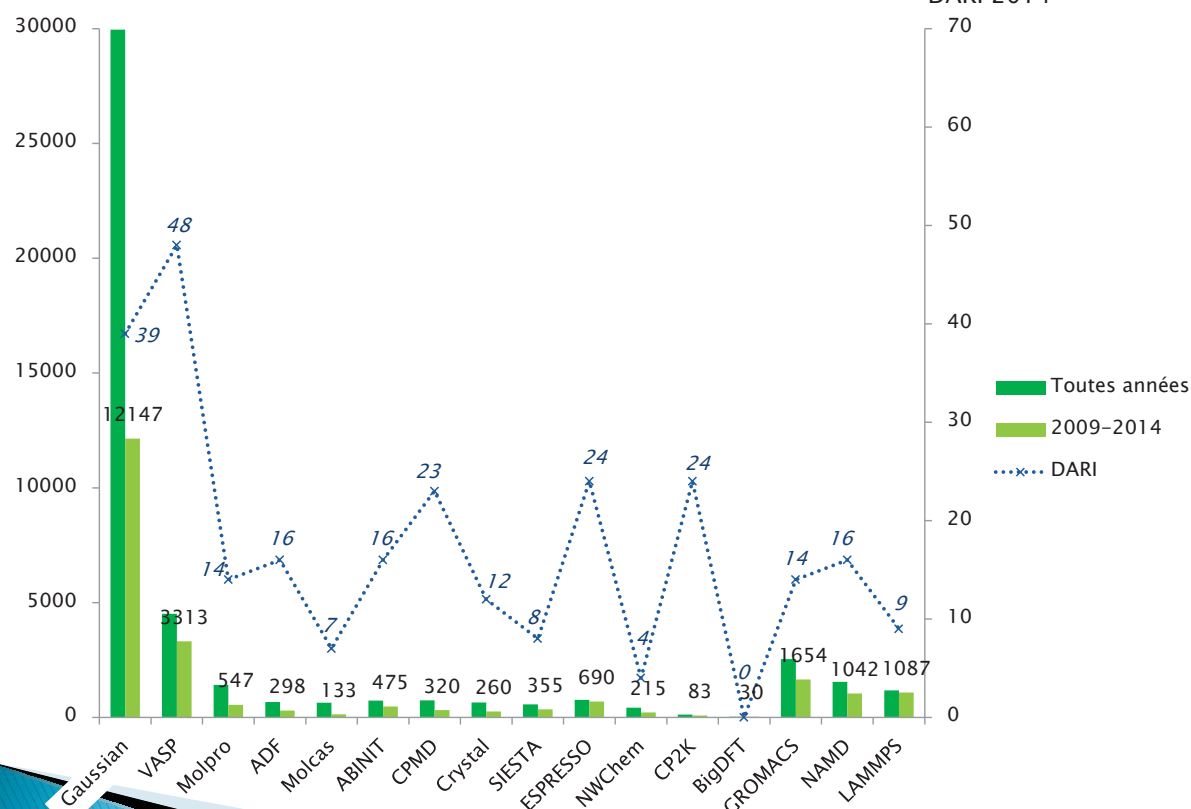


► 16 logiciels disponibles

Popularité des logiciels

Nombre de publications
ScienceDirect

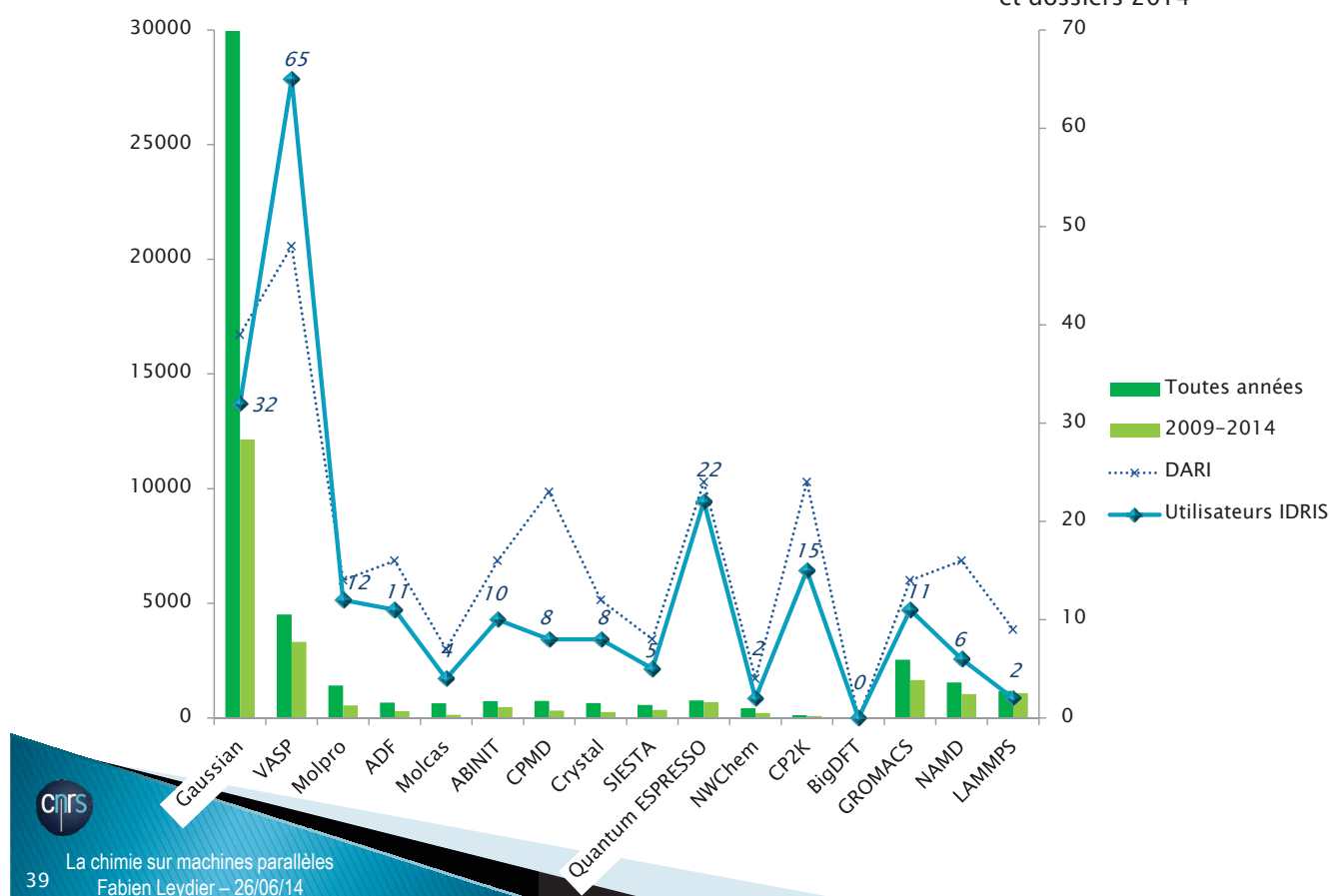
Nombre de dossiers
DARI 2014



Popularité des logiciels

Nombre de publications
ScienceDirect

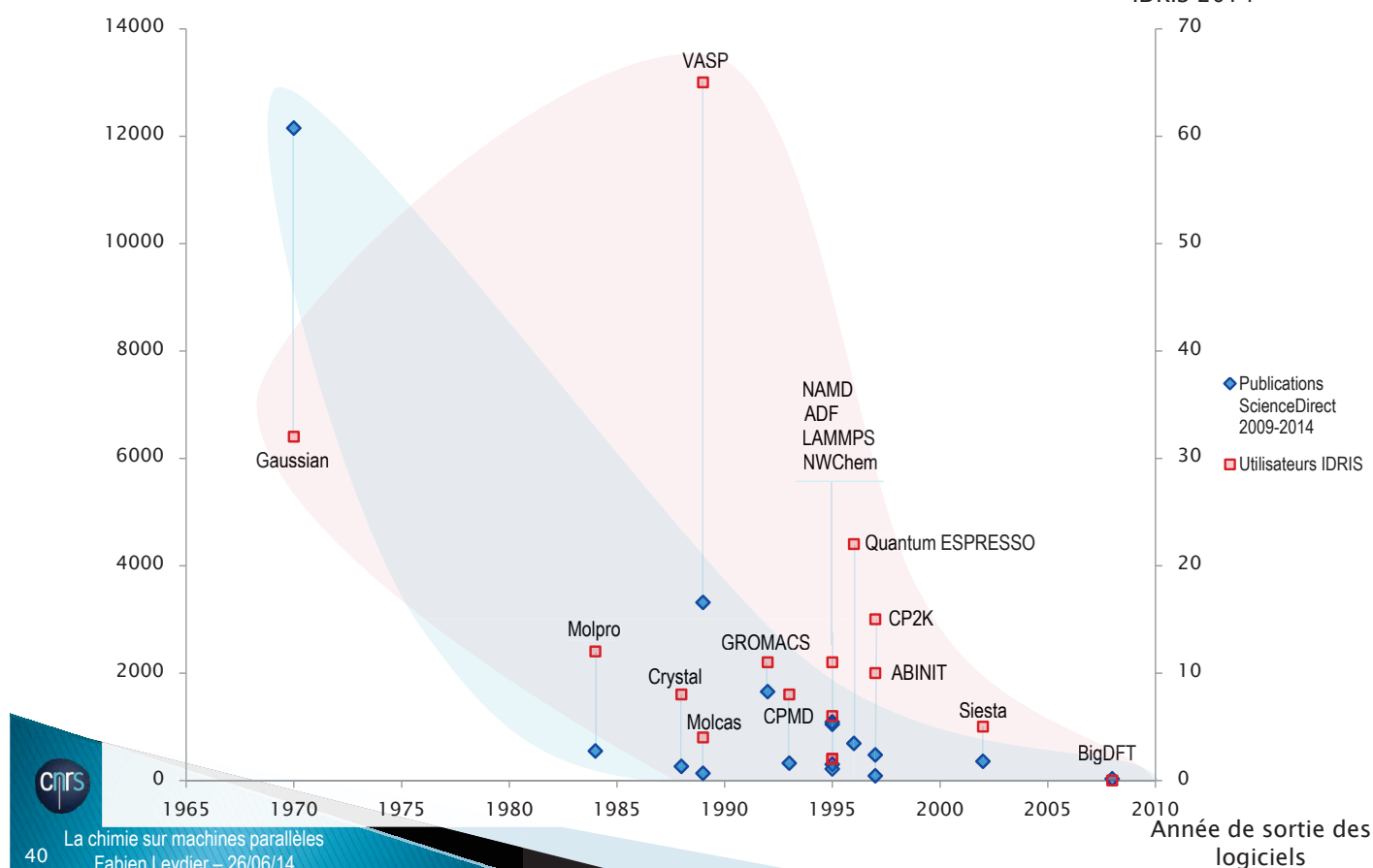
Nombre d'utilisateurs
et dossiers 2014



Popularité des logiciels

Nombre de publications
ScienceDirect

Nombre d'utilisateurs
IDRIS 2014



Utilisateurs, Licences, Prix

Accès
 ■ = Libre
 ■ = A demander
 ■ = Licence exigée

Logiciels	Nombre de dossiers	Nombre d'utilisateurs		Prix	Type de licence à l'IDRIS	Type de fichiers fournis	Accès à l'IDRIS
		Ada	Turing				
Gaussian	39	32	–	28750\$ +575\$	Site / Version / 20 ans	Source	ACL
VASP	48	60	5	1000€ / groupe	Maintenance / Version	Source	ACL
Molpro	14	12	–	10000£	Site / Version	Source	Libre
ADF	16	11	–	6400€	Site / Version / 1 an	Bin	Libre
Molcas	7	4	–	50000SEK (5900€)	Site / Version / 1 an	Source	Libre
ABINIT	16	10	0	0	GNU GPL	Source	Libre
CPMD	23	5	3	0	Site	Source	Libre
Crystal	12	7	1	6800€	Site / Version	*.o	ACL
SIESTA	8	5	–	0	Site	Source	ACL
Quantum ESPRESSO	24	22	0	0	GNU GPL	Source	Libre
NWChem	4	2	0	0	ECL	Source	Libre
CP2K	24	11	4	0	GNU GPL	Source	Libre
BigDFT	0	0	0	0	GNU GPL	Source	Libre
GROMACS	14	8	3	0	GNU GPL	Source	Libre
NAMD	16	5	1	0	GNU GPL	Source	Libre
LAMMPS	9	1	1	0	GNU GPL	Source	Libre

CNRS

La ch

41

Fabien Leydier – 26/06/14

Formalisme et parallélisation

■ = Installé à l'IDRIS
 ■ = Pas de GPU à l'IDRIS
 ■ = En cours d'étude

Logiciels	Nombre d'utilisateurs		Prix	Formalisme de calcul		Type de parallélisation			
	Ada	Turing		Chimie Quantique (DFT, ...)	Système de particules (champs de forces, biochimie, etc)	OpenMP	MPI	MPI + OpenMP	GPU
Gaussian	32	–	28750\$ +575\$	✓		★ ★ ★ ★ ✓	★ ★ ★ ★	★ ★ ★ ★	■
VASP	60	5	1000€ / groupe	✓			✓		■
Molpro	12	–	10000£	✓			✓		■
ADF	11	–	6400€	✓			✓		■
Molcas	4	–	50000SEK (5900€)	✓			✓		■
ABINIT	10	0	0	✓		✓	✓	✓	✓
CPMD	5	3	0	✓		✓	✓	✓	■
Crystal	7	1	6800€	✓			✓		■
SIESTA	5	–	0	✓			✓		■
Quantum ESPRESSO	22	0	0	✓		✓	✓	✓	✓
NWChem	2	0	0	✓			✓		■
CP2K	11	4	0	✓		✓	✓	✓	■
BigDFT	0	0	0	✓		✓	✓	✓	✓
GROMACS	8	3	0		✓		✓	✓	✓
NAMD	5	1	0		✓	✓	✓	■	✓
LAMMPS	1	1	0		✓		✓	✓	✓

41

Fabien Leydier – 26/06/14

Propriétés et spécificités – chimie quantique

Logiciel	Dimension des systèmes	Base de projection	Fonctionnelles	Nombre de possibilités
Gaussian	0, 1, 2, 3D	GTO	~46 (dont hybrides)	★★★★★
VASP	3D	PW	~11 (dont hybrides)	★★★☆☆
ABINIT	3D	PW	25 (+ LibXC)	★★★★★
Quantum ESPRESSO	3D	PW	~25 + hybrides	★★★★★
CPMD	0, 1, 2, 3D	PW	~19 (dont hybrides)	★★★★★
ADF	0, 1, 2, 3D	STO	~28 (dont hybrides)	★★★★★
Molpro	0D	GTO	~50 (dont hybrides)	★★★★★
CP2K	0, 1, 2, 3D	GTO+PW	~25 (+LibXC)	★★★★★
SIESTA	3D	NAO	~8	★★★☆☆
Molcas	0D	GTO	~33 (dont hybrides)	★★★★★
Crystal	0, 1, 2, 3D	GTO	~19 (dont hybrides)	★★★★★
NWChem	0, 1, 2, 3D	GTO	~82 (dont hybrides)	★★★★★
BigDFT	0, 1, 2, 3D	ondelettes	25 (+ LibXC)	★★★★★

Nombre Hybrides 3D fonctionnelles

43

La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

Propriétés et spécificités – chimie quantique

Logiciel	Vibrations	TDDFT	Dynamique	QM/MM	MP2	RMN	Etat de transition	Autres
Gaussian	+ Anharm.			ONIOM				Magnétisme, solvant, dichroïsme, UV/Vis
VASP								
ABINIT								
Quantum ESPRESSO								EPR, spectres X
CPMD								
ADF								UV/Vis, solvant, Mosbauer, spectres X, magnétisme, EPR
Molpro	+ Anharm.							MCSCF, transitions e ⁻
CP2K								EPR
SIESTA								
Molcas								MCSCF, solvant
Crystal	+ Anharm.							
NWChem				ONIOM				solvant, MCSCF, transitions e ⁻
BigDFT								XANES

44

La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

Importance de l'installation

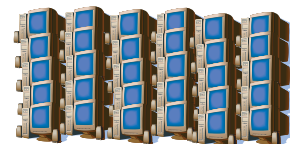
► Sur un PC de laboratoire

- Environnement testé par les développeurs
- Installation « classique »
 - Méthode d'installation livrée avec le logiciel conçue pour un environnement standard



► Sur un supercalculateur

- Environnement spécifique
 - Chemins des dossiers non standard, dossiers partagés, bibliothèques spécifiques, etc.
- Installation « non classique »
 - Si prévue par les développeurs : installation facilitée, options de compilation à tester
 - Si non prévue : peut devenir laborieux, options de compilation à adapter et à tester
- Exemple illustratif



Quantum Espresso v5.0.1	Optimisations désactivées, bibliothèques internes	Options par défaut, bibliothèques internes	Optimisé, bibliothèques externes	Sur-optimisé, bibliothèques externes
Options de compilation	-O0	-O2	-O2, -xAVX, mkl	-O3, -xAVX, -parallel, mkl
Temps elapsed (MOR, PBE, Γ , 10 pas)	3 h 3 min	20 min 28 s	6 min 6 s	9 min 0 s

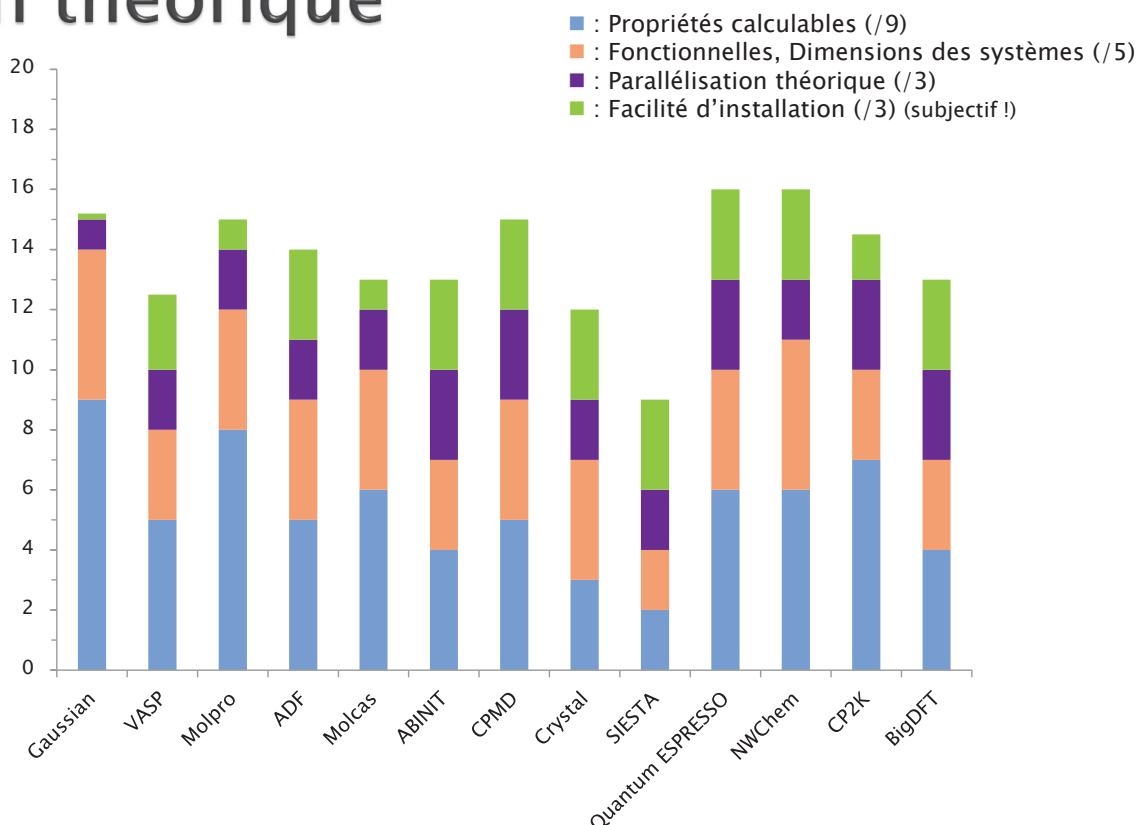
(32×8 cœurs)



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

45

Bilan théorique



- Globalement, tous les logiciels se valent en théorie
 - Mais certains restent spécifiques



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

46

Logiciels orientés biochimie et champs de force

- ▶ Paramètres critiques pour les performances
 - Un système typique est composé de milliers (voire millions !) de particules
 - Décomposition du système étudié
 - Répartition sur les cœurs de calcul
 - Implémentation de méthodes de calcul
 - Particule Mesh Ewald (PME), Verlet, etc.

Retour d'expériences

Logiciel	Conservation de l'énergie	Champs de force	Extensibilité	Autre
NAMD	Très bon	Implémentation très rigoureuse	Bonne extensibilité, équilibrage de charge automatique	
GROMACS	Moins rigoureux	Portage de certains champs avec concessions sur la précision	Bonne extensibilité selon l'algorithme, équilibrage de charge automatique	Performance des calculs PME à étudier au préalable de l'étude, mécanisme pratique de <i>restart</i>
LAMMPS		Grande variété de champs de force disponible	Bonne extensibilité selon les options	Plus lent que les autres logiciels pour les systèmes biologiques (facteur 2 à 6)

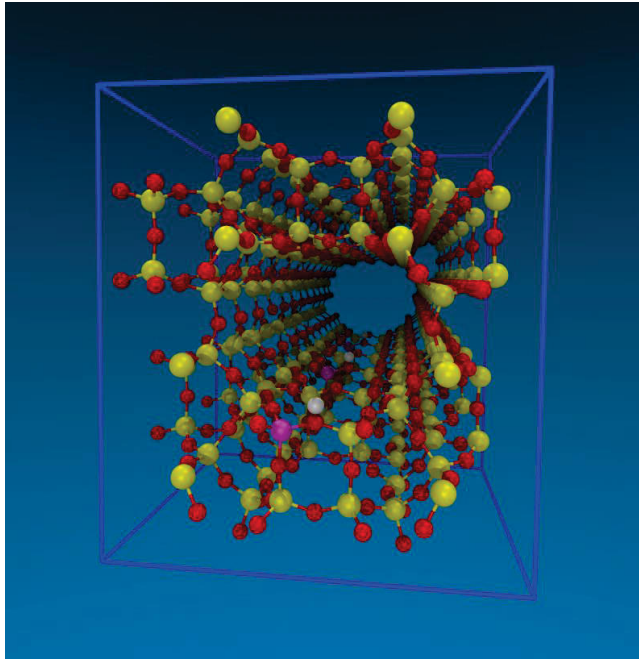
Conclusion

- ▶ **Tous les logiciels de chimie sont parallèles...**
 - ...mais à des degrés différents
 - Les logiciels gratuits sont les plus parallèles !
 - Ce sont surtout les plus récents
- ▶ **Tous ne permettent pas les mêmes types de calculs**
 - Théories implémentées
 - Propriétés « exclusives »

Utilisation des logiciels : Aspects pratiques, parallélisme et performances

Performances des logiciels

- Systèmes utilisés pour les expérimentations
 - Systèmes « de base »



Zéolithe H-MOR

289 atomes

$$18,26 * 20,53 * 15,08 (\text{\AA}) = 5,7 \text{ nm}^3$$

Zéolithe MOR

144 atomes

Cube H₂O

1536 atomes



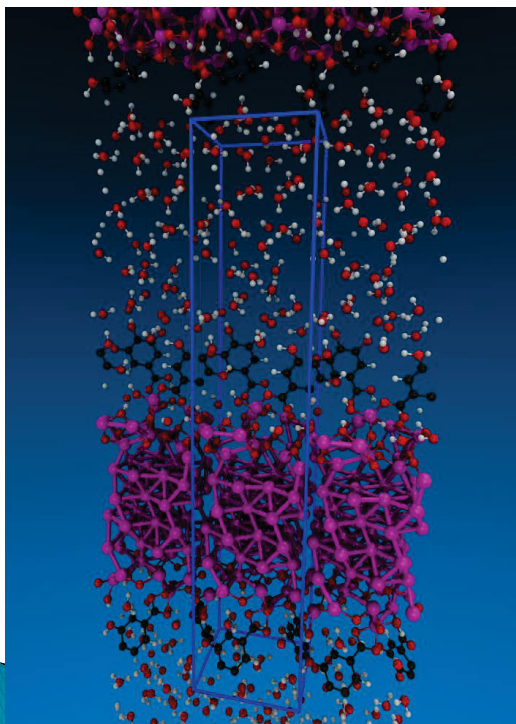
La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

51

<http://www.iza-structure.org/databases/>

Performances des logiciels

- Systèmes utilisés pour les expérimentations
 - Système « complexe »



Surface d'alumine- γ hydroxylée avec
dépôt organique et solvant explicite

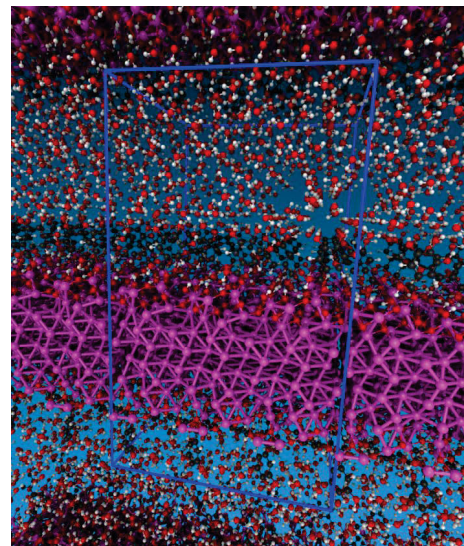
336 atomes

3008 atomes

$$9,79 * 8,48 * 50,00 (\text{\AA}) = 4,2 \text{ nm}^3$$

$$37,4 \text{ nm}^3$$

× 9



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

52

T. Ribeiro & D. Costa

Utilisation mémoire/disque

► Certains codes utilisent le disque au lieu de la mémoire

- Utile lorsqu'il n'y a pas assez de mémoire
- L'accès disque est lent par rapport à l'accès mémoire

« Un code de chimie utilise intensivement le disque »

Logiciel	GPFS disques	GPFS SSD (block 4Mo)	GPFS SSD (block 256ko)	Disque local (SATA)	GPFS SSD, utilisation « correcte »
CRYSTAL 09	1590 s	1575 s	870 s	899 s	235 s
Logiciel	GPFS disques	GPFS SSD (block 4Mo)	GPFS SSD (block 256ko)	Disque local (SATA)	GPFS SSD, « sans I/O »
Quantum ESPRESSO	1966 s	1909 s	1924 s	2024 s	641 s

Tailles des buffers ajustées

(Temps obtenus sur un système fictif, permettant un contrôle strict des cycles de calcul, sur 32 cœurs)

Écriture des fichiers binaires désactivée (fct. d'onde, etc)

⇒ **Privilégier la mémoire quand c'est possible**



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

53

Gestion des I/O en « parallélisme massif »

► Souvent pénalisant car séquentiel

VASP MOR, 289 atomes 1024 MPI	Utilisation par défaut (~1 Go d'I/O)	« Sans I/O »
2 pas de géométrie	662 s	338 s
10 pas de géométrie	1383 s	1058 s

► Le nombre de fichiers peut devenir prohibitif

CRYSTAL MOR, 289 atomes 1 cycle SCF 1024 MPI	Utilisation par défaut, PCrystal	Utilisation par défaut, MPPCrystal	Paramètres adaptés, MPPCrystal
Nombre de fichiers générés	12300 fichiers	1040 fichiers dont 1024...vides!	
Temps de restitution	Crash en 420 s	1239 s	1117 s



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

54

Crystal

► Versions du programme (MPI)

◦ PCrystal

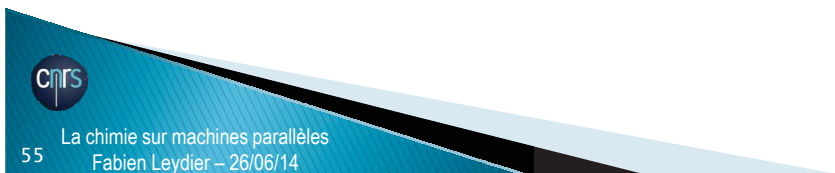
- Version dite « à mémoire répliquée » : toutes les matrices sont copiées pour chaque processus
- Génère toutes les données sur le disque
 - Critique pour les performances, tous les fichiers sont lus/écrits en même temps
 - Si N_{MPI} élevé, le *file system* peut même être saturé (surtout sur Turing)

⇒ Pour les systèmes de petite/moyenne taille uniquement, surtout si beaucoup de symétrie

◦ MPPCrystal

- Version dite « à mémoire distribuée » : les matrices sont réparties sur les processus
- Beaucoup moins d'accès disque que PCrystal
 - Mais plus de communications MPI
- Certaines propriétés ne sont pas accessibles (IR notamment)

⇒ Pour les systèmes de taille importante uniquement



Crystal

► Fichiers d'entrée Pcrystal

- Noms des fichiers imposés
 - « INPUT » pour le fichier principal
 - fort.## pour les fichiers écrits/lus (fonction d'onde, etc.)
 - Consulter le manuel pour la description de tous les numéros de fichiers
- Pas de commandes spéciales pour la parallélisation
- Messages d'information sur les tampons mémoire :

```
WARNING **** GENBUF **** COULOMB BIPO BUFFER TOO SMALL - TO AVOID I/O SET BIPOSIZE = 17315175
WARNING **** EXCBUF **** EXCH. BIPO BUFFER TOO SMALL - TO AVOID I/O SET EXCHSIZE = 7652340
```

- Tampons trop petits ⇒ génère énormément d'accès disque !
 - Indiquer les valeurs dans le fichier principal (dans cet exemple : BIPOSIZE ↴ 17400000 ↴ EXCHSIZE ↴ 7660000 ↴)

► Fichiers d'entrée MPPCrystal

- Noms de fichiers identiques à PCrystal
- Fichier principal
 - Ajouter la commande « MPP »
 - Sinon lance une version approchée de Pcrystal
- Messages d'information sur la parallélisation (points k) :

```
WARNING **** MPP **** ALL K POINTS DONE BY ALL PROCESSORS
INFORMATION **** MPP **** This is because either:
INFORMATION **** MPP **** a) There are many k point relative to the number of processors or
INFORMATION **** MPP **** b) Each k point would have to run on a prime number of processors
```

- Pas assez de cœurs ou problème de répartition des points k

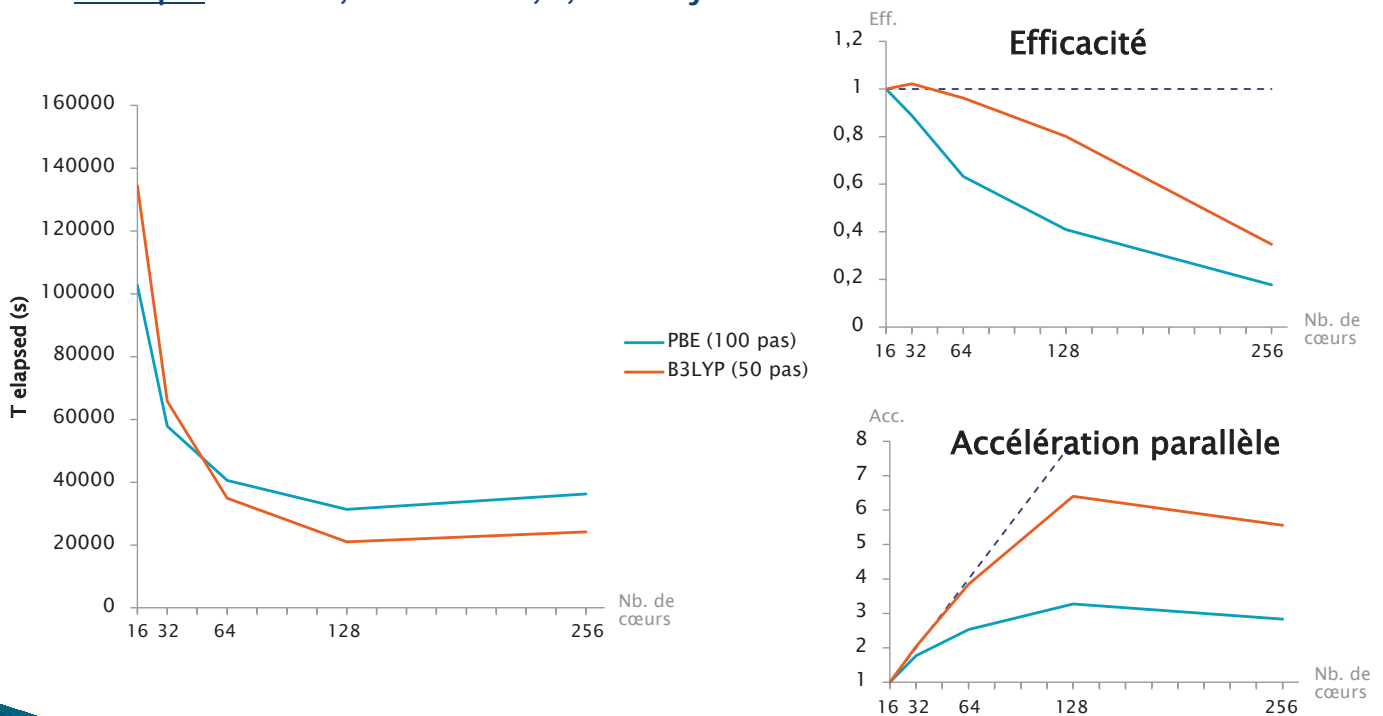
◦ Information sur les tampons mémoire identiques à Pcrystal



Crystal

► Performances

- Exemple : H-MOR, 298 atomes, Γ , MPPCrystal



⇒ La charge par cœur augmente

Quantum ESPRESSO

► Aspect performances

- Options de l'exécutable pw.x, gérant l'affectation des cœurs
 - `-nimage n` : décompose en n images le système (état de transition, etc.).
 - `-ndiag n` : diagonalisation des matrices Hamiltoniennes (la valeur au carré ne doit pas dépasser le nombre de cœurs).
 - `-npool n` : partage des points k sur les cœurs (pour le point gamma, laisser par défaut ou mettre 1).
 - `-ntg n` : groupe pour les calculs de FFT.
 - Par défaut : toutes ces valeurs valent 1.
- Version 4.3+ : valeurs censées s'adapter (mais à tester), mais informations sur la parallélisation moins détaillées
- Utilisation disque
 - `disk_io = 'low'` ou `'none'` : calcule tout en mémoire (puis écrit la fonction d'onde si 'low')

Quantum ESPRESSO

► Aspect performances

- Exemples de sorties, **version 4.2** : MOR (144 atomes), PBE, 30 Ry, **pur MPI**

16 cœurs :

Proc/ Pool	planes (dense)	cols (grid)	G	planes (smooth)	cols (grid)	G	columns (wavefct)	G
1	4	798	26462	4	798	26462	200	3312
2	4	798	26462	4	798	26462	200	3308
3	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
4	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
5	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
6	3	801	26462	3	801	26462	199	3307
7	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
8	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
9	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
10	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
11	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
12	3	798	26462	3	798	26462	200	3308
13	3	798	26462	3	798	26462	198	3306
14	3	802	26462	3	802	26462	198	3306
15	3	802	26462	3	802	26462	198	3306
16	3	802	26462	3	802	26462	198	3306
tot	50	12783	423391	50	12783	423391	3191	52923

Déséquilibre de charge

64 cœurs :

48	1	200	6612	1	200	6612	50	826
49	1	200	6612	1	200	6612	50	826
50	1	200	6612	1	200	6612	50	826
51	0	200	6612	0	200	6612	50	826
52	0	200	6612	0	200	6612	50	826
53	0	200	6612	0	200	6612	50	826
54	0	200	6612	0	200	6612	50	826
55	0	200	6612	0	200	6612	50	826
56	0	200	6612	0	200	6612	50	826
57	0	200	6612	0	200	6612	50	824
58	0	200	6612	0	200	6612	50	824
59	0	200	6612	0	200	6612	50	824
60	0	200	6612	0	200	6612	50	822
61	0	200	6612	0	200	6612	50	822
62	0	198	6610	0	198	6610	50	822
63	0	198	6610	0	198	6610	50	822
64	0	198	6610	0	198	6610	50	822
tot	50	12783	423391	50	12783	423391	3191	52923

Des cœurs ne participent pas directement au calcul!

Des cœurs ne participent pas directement au cal

⇒ **Solution : utiliser des *threads* OpenMP**

- Exemple de sortie, Version 4.3+ : informations sur le parallélisme moins détaillées

Parallelization info

sticks:	dense	smooth	PW	G-vecs:	dense	smooth	PW
Min	198	198	48		6610	6610	822
Max	200	200	52		6620	6620	830
Sum	12783	12783	3191		423391	423391	52923
Tot	6392	6392	1596				

Restitution en 114 pas

- 64 cœurs : 114 min
(modification d'algorithme ?)

CPMD

► Aucune option définissant l'exécution en parallèle

- Répartition des cœurs automatique pour le calcul de la fonction d'onde
 - Extensibilité fortement dépendante du système étudié

► Aspect performances

- Fichier d'entrée

- MEMORY BIG

- Sur Ada : permet de stocker des facteurs de structure du *cutoff* de la densité en mémoire (évite de les recalculer à chaque besoin)
- Sur Turing : attention à la mémoire disponible

- `CG_GROUPS` ↓ `n` (anciennement `TASKGROUPS`)

- Globalement, partage des cœurs pour traiter les bandes en parallèle
- Améliore l'extensibilité lors de l'utilisation de beaucoup de tâches MPI

- Ondes planes

- Même problématique que Quantum Espresso

- Utiliser des *threads* OpenMP pour améliorer l'extensibilité

NCPU	NGW	NHG	PLANES	GXRAYS	HXRAYS	ORBITALS	Z-PLANES
0	893	6621	2	42	166	12	1
1	893	6621	2	42	166	13	1
2	897	6631	2	42	166	12	1
3	897	6627	2	42	166	12	1
4	898	6633	2	44	166	13	1
5	898	6627	2	44	166	12	1
6	900	6629	2	44	166	13	1
7	898	6625	2	44	166	12	1
8	896	6625	2	44	166	12	1
9	896	6625	2	44	166	13	1

CP2K

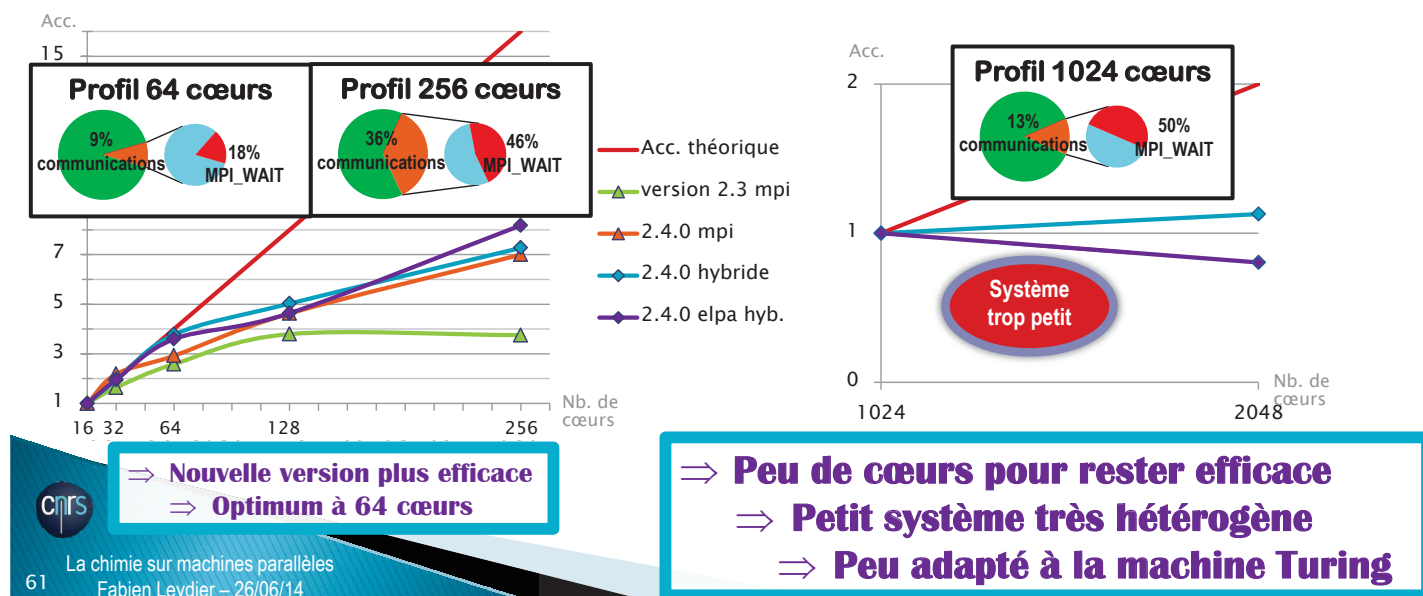
► Aucune commande spéciale pour lancer en parallèle

- Répartition des cœurs automatique pour le calcul de la fonction d'onde
 - Extensibilité fortement dépendante du système étudié
- Pas d'information concrète donnée sur la répartition effective (hormis par atome...)

► Performances

- Exemple : Système « complexe », 336 atomes, PBE

Accélération parallèle

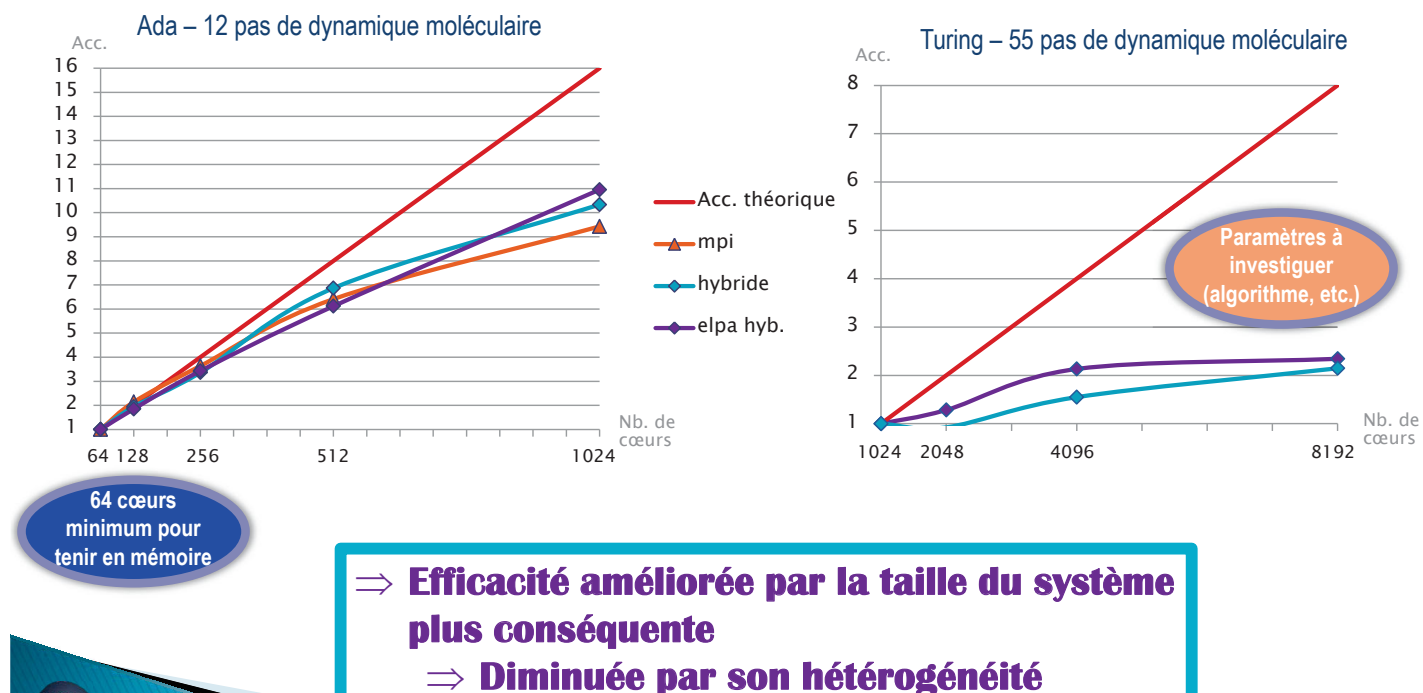


CP2K

► Performances

- Exemple : Système « complexe », 3008 atomes, PBE

Accélération parallèle



► Aucune option définissant l'exécution en parallèle

- Par défaut : parallélisation sur les points k
 - Pour obtenir les performances les meilleures, $N_{\text{cœurs}} \propto \text{nb points k}$
- mpi_setup1 : WARNING –**
 Your number of k-points (60) will not distribute correctly
 with the current number of processors (32).
 You will leave some empty.
ACTION: you can reduce number of processors to 30 without losing speed.

► Obtenir de meilleures performances

- Parallélisation « KGB »
 - Points k (K), vecteurs d'onde (G) et bandes (B)
 - Mot-clé : **paral_kgb**
 - Non automatique : il faut déterminer le nombre de cœurs attribués pour chaque type
 - ABINIT peut tester des configurations :
 - 1°) Lancer le calcul sur 1 cœur, avec **paral_kgb=1** et **max_ncpus=N_{cœur}** (anciennement : **paral_kgb=-N_{cœur}**), sans autre option (très rapide, même réalisable en amont sur sa machine)
 - 2°) Récupérer la meilleure configuration dans le fichier de sortie
 - 3°) Lancer le calcul avec la meilleure configuration : **npkpt, npband, npfft**

► Aucune option définissant l'exécution en parallèle

► Obtenir de meilleures performances

- Fichier INCAR
 - Mots-clés à préciser
 - LPLANE = .TRUE.**
 - NPARG = valeur optimale**
 - LSCALU = .FALSE.**
 - NSIM = 4**
 - [KPAR = valeur souhaitée] → version 5.3.x**
 - Valeurs testées, à consulter sur notre site web
- Messages d'erreur typiques
 - “ **internal ERROR RSPHER:running out of buffer** ”
 - NPARG trop faible
 - Le calcul reste en machine ! → contrôler son bon déroulement au tout début
 - Messages de **WARNING** en début de fichier OUTCAR
 - NPARG n'obéit pas à une règle précise (testé)
 - Pour la parallélisation sur les points k, vérifier les résultats car toujours en développement (pas de soucis rapportés pour l'instant)

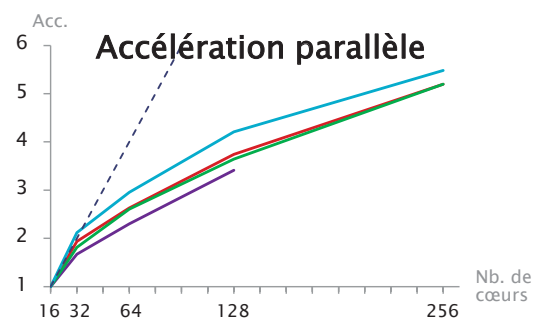
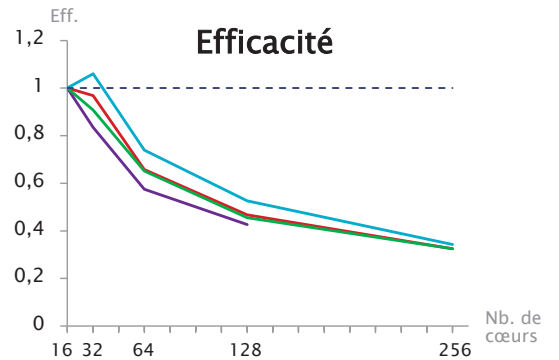
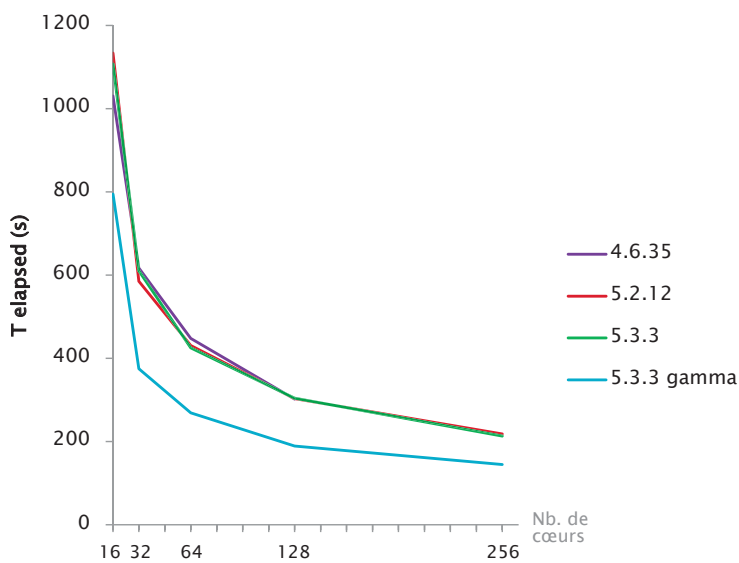
Exemple : PBE, 400eV, Γ , 2 pas de géom.
VASP 5.3.3, 64 cœurs :

- NPARG=1 : $t_{\text{elapsed}} = 812 \text{ s}$
 - NPARG=8 : $t_{\text{elapsed}} = 477 \text{ s}$
 - NPARG=64 : $t_{\text{elapsed}} = 425 \text{ s}$
 - VASP Gamma : $t_{\text{elapsed}} = 269 \text{ s}$ (NPARG=4)
- Annotations : $812 \div 1,9 \approx 477$ et $477 \div 1,6 \approx 425$

VASP

► Performances

- Exemple : H-MOR, 298 atomes, PBE, 400 eV, Γ , avec/sans dispersion, 2 pas



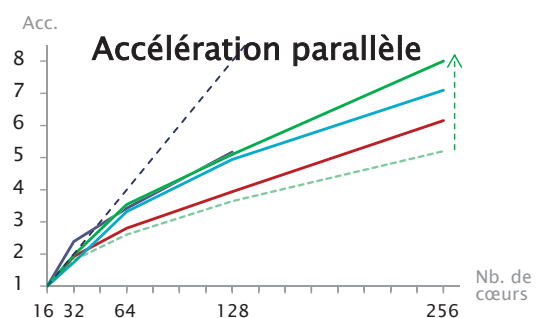
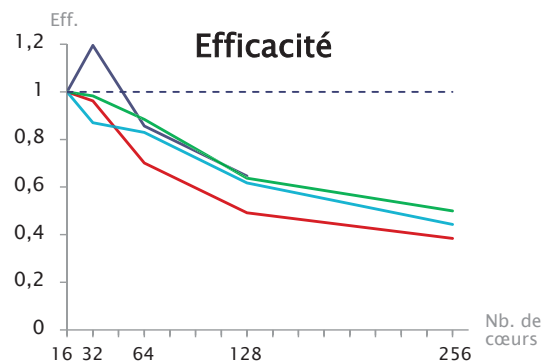
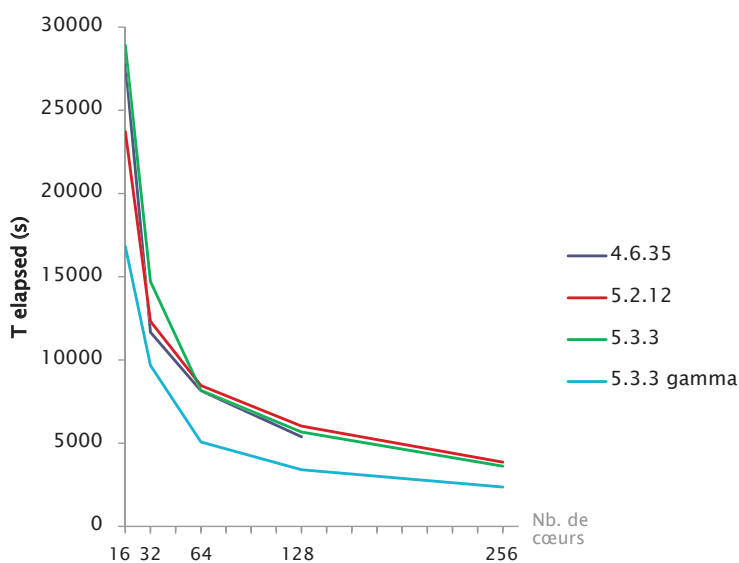
La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

65

VASP

► Performances

- Exemple : H-MOR, 298 atomes, PBE, 400 eV, Γ , avec/sans dispersion, **100 pas**

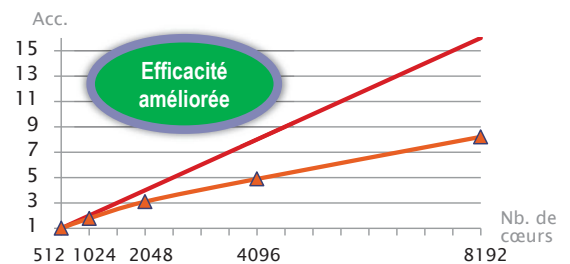
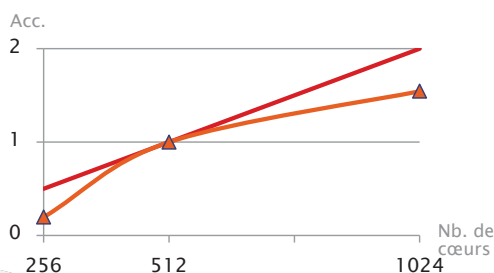
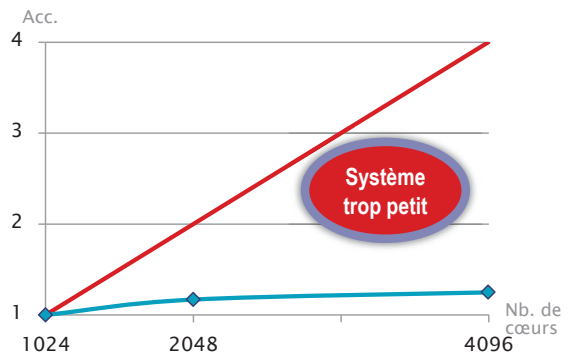
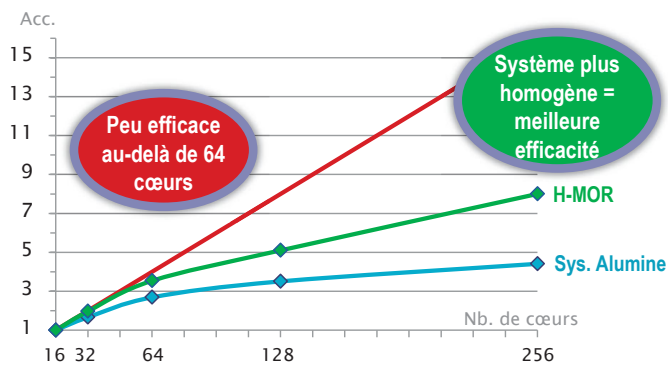


La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

66

⇒ Impact de la phase d'initialisation

► Performances : nature du système



⇒ **Impact de la taille du système et de son homogénéité**

Gaussian

► Fichier d'entrée Gaussian

◦ `%NProcShared=Ncœurs`

- Si `%NProcShared > Ncœurs` : message : « **Inconsistency in NProc: NTCur= 32 but real number of threads= 4** », ou lancement d'un nombre supérieur de *threads* (performances **fortement** dégradées, plantage)
- Si `%NProcShared < Ncœurs` : on se limite nous-mêmes, et $\text{facture} = t \times N_{\text{cœurs}}$
- `%NProc` est obsolète

`%NProcShared=32`

Will use up to 32 processors via shared memory.

- Exemples de sorties si `%NProcShared` n'est pas adapté au calcul :

PrsmSu: requested number of processors reduced to: 10 ShMem 1 Linda.

CalDSu: requested number of processors reduced to: 28 ShMem 1 Linda.

GetIJB would need an additional 45990731 words of memory to use all 32 processors.

DoSDTr: NPSUse= 13

JobTyp=1 Pass 1: I= 1 to 5 NPSUse= 1 ParTrn=F ParDer=F DoDerP=T.

⇒ difficile d'évaluer le nombre de cœurs maximum sans tester avec son système

◦ `%Mem=## GB`

- Attribution dynamique de la mémoire pour le calcul
- Par défaut : 256 MB !
- La valeur de `#@ as_limit` est trop élevée, mettre environ $(\text{as_limit} - 1.0 \text{ GB} * (N_{\text{cœurs}} + 1))$

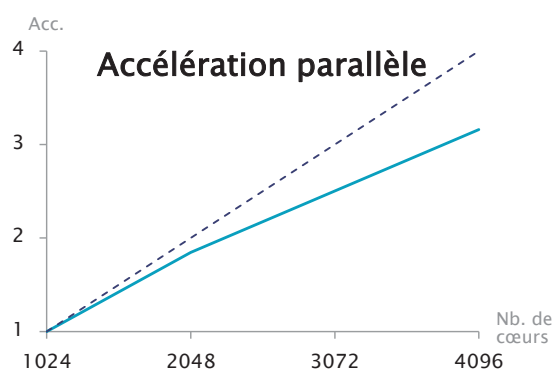
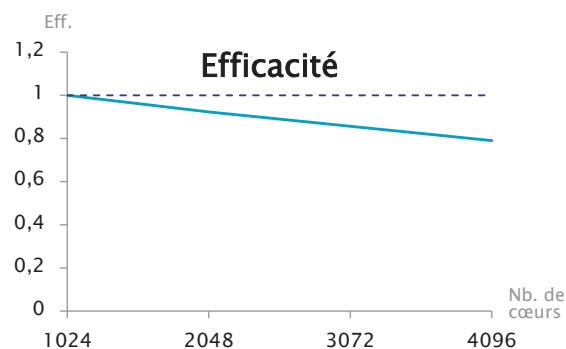
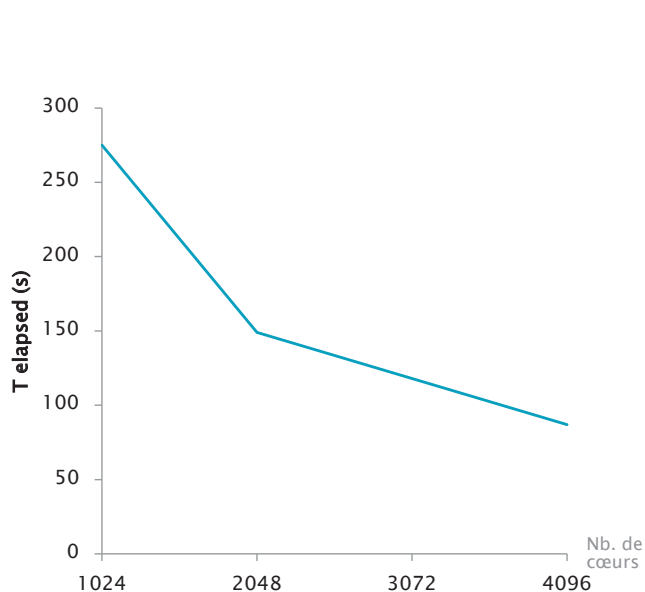
◦ `#P fonctionnelle type_de_calcul etc.`

- Donne des informations supplémentaires en sortie (entrée dans les Links, convergence des cycles SCF, etc.)

BigDFT

► Performances

- Exemple : 512 H₂O, PBE, formalisme ondelettes, benchmark Turing



⇒ **Système homogène et symétrique**

⇒ **Bonne extensibilité**

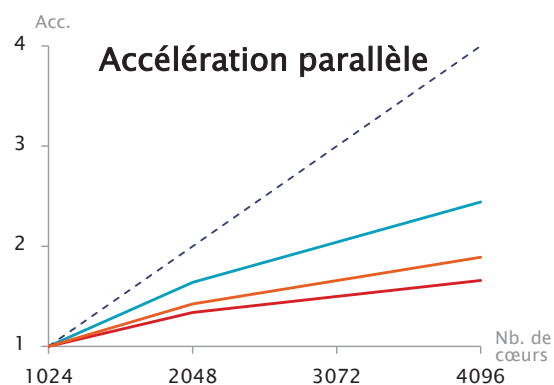
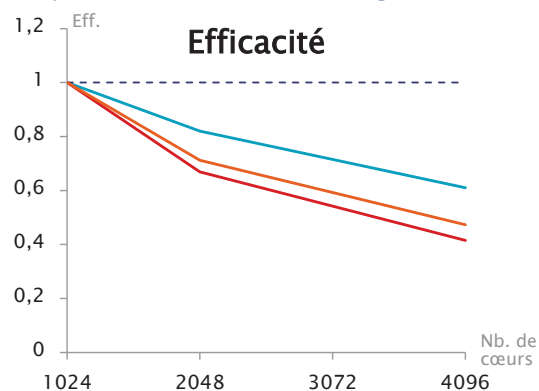
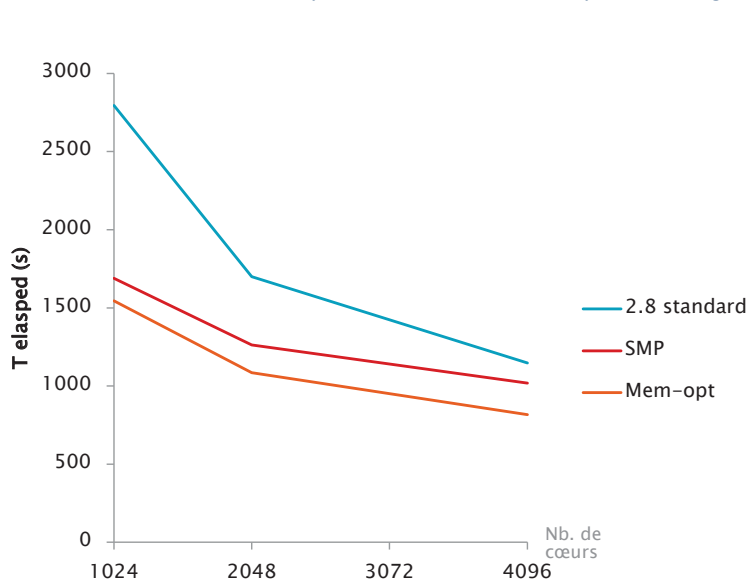
La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

69

NAMD

► Performances

- Exemple : Canal bactérien (récepteur nicotinique humain) + propofol lié au canal, 600000 particules, 50000 pas de dynamique, benchmark Turing



Remarques générales

- ▶ Faire des tests d'extensibilité avec ses propres systèmes
 - La référence doit être prise pour le nombre de cœurs minimal permettant le traitement du calcul
 - Attention, le nombre de processus effectif peut être « choisi » par le logiciel (Gaussian, ADF)
 - L'extensibilité est de fait limitée
 - Pour les logiciels parallélisés en hybride, il n'y a pas de formule universelle entre la répartition du nombre de processus MPI et du nombre de threads OpenMP

Aspect pratique : le « *restart* »

- ▶ 2 types de « *restart* »
 - Mots-clés dans le fichier d'entrée
 - Nécessite d'éditer le fichier d'entrée pour continuer le calcul (ou créer un fichier dédié)
 - Syntaxe à respecter
 - Cascade de *jobs* peu pratique
 - Fichiers de sortie à donner en entrée
 - Nécessite de connaître le nom des fichiers concernés (voir au besoin les manuels)
 - Utile lorsque le « *restart* » n'est pas implémenté (ex : dynamique, optimisation de géométrie)
 - Cascade de *jobs* facile à mettre en place (si aucun traitement autre que le nom des fichiers)
 - Parfois les deux types sont nécessaires

Aspect pratique : le « restart »

Logiciel	Fonction d'onde	Géométrie	Vibrations	Dynamique	Etat de transition	RMN	Autre	Type de restart
Gaussian								■ = Prévu par le logiciel ■ = Non prévu mais faisable ■ = Non prévu
VASP								
ABINIT								
Quantum ESPRESSO								
CPMD							TDDFT	
ADF								
Molpro							Intégrales	
CP2K								
SIESTA								
Molcas							Intégrales	
Crystal								
NWChem								
BigDFT								



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

73

Bilan de la journée

- Calculer de la chimie avec du parallélisme
 - C'est possible et même « obligatoire » dans un centre national !
 - Demande d'utiliser au mieux les logiciels
 - Utiliser les options adaptées
 - Elles ne sont pas déterminées automatiquement par les logiciels
 - Etudier les manuels, tutoriaux, etc.
 - Impératif : adapter les besoins logiciels et matériels à son étude
 - La parallélisation du logiciel représente 50 % du problème
 - Migrer vers les solutions actuelles, les plus parallèles
 - Requiert un temps d'adaptation, qui sera forcément payant sur du plus long terme
 - Le système traité représente les 50 % restants
 - Eviter les systèmes trop « petits »



La chimie sur machines parallèles
Fabien Leydier – 26/06/14

74



Actualités

- 20/06/2014 - Journée consacrée aux logiciels de chimie sur machines parallèles le 26 juin 2014.
- 13/05/2014 - Session portage et optimisation sur Blue Gene/Q du 01 Juin au 2 juillet 2014.
- 31/01/2014 - Philippe Wauclaire est l'un des lauréats du Cristal 2014 du CNRS.

En un clic

L'IDRIS

- Présentation
- L'IDRIS à 20 ans !
- Calculateurs
- Plan d'accès

Documentation

- Tutoriel
- Ada
- Adapp
- Chimie

Calculer

- Demande d'heures DARI
- Formulaires
- Extranet
- Problème de mot de passe ?
- FAQ générale
- Disponibilité des machines

Formations

- Prochaines sessions
- Inscription
- Supports de cours

Logiciel	Ada (IBM X8700)	Tutoriel (IBM Blue Gene/Q)	Type de calcul
ABINIT	7.6.2 7.4.1 7.0.0	7.4.1	Chimie quantique ab initio (DFT)
ADF	2013.01a 2012.01a	---	Chimie quantique ab initio (DFT)
BigDFT	1.7-dev.28	1.7-dev.28	Chimie quantique ab initio (DFT) avec formalisme d'ondes planes
CP2K	2.5.1_13632 2.4.2_12993 2.4.3_12978 2.2_12043	2.5.1_13632 2.4.2_12993 2.3_12043	Simulations moléculaires et atomiques ab initio
CPMD	3.17.1 3.16.0 3.15.2	3.17.1 3.16.0 3.15.2	Car-Parrinello Molecular Dynamics. Dynamique moléculaire et structure électronique ab initio
Crystal	14.v1.0.2 09.v2.0.1	14.v1.0.2 09.v2.0.1	Chimie quantique ab initio (systèmes périodiques)
Gaussian	09 rev. C01 09 rev. C01 09 rev. A02 03 rev. D02	---	Chimie quantique ab initio
GRACIAS	4.6.5 4.6.3 4.5.5	4.6.5 4.5.5	Code de dynamique moléculaire
LAMMPS	01 February 2014 10 October 2012	01 February 2014 10 October 2012	Code de dynamique moléculaire
Molcas	7.8	---	Chimie quantique ab initio
Molpro	2012.1 2010.1	---	Chimie quantique ab initio
NAMD	2.9 2.8 2.7	2.9 2.8 2.7	Code de dynamique moléculaire, notamment pour les biomolécules
NRChem	6.2 6.1.1	6.2 6.1.1	Northwest Computational Chemistry Package. Logiciel de calcul ab initio
Quantum ESPRESSO	5.0.2 5.0.1 4.5.2 4.2.1	5.0.2 5.0.1 4.5.2 4.2.1	Logiciel de calcul ab initio
Siesta	3.2 3.1 3.0.2	---	Logiciel de calcul ab initio, avec base d'orbitales numériques (NAO)
VASP	5.3.5 5.3.3 5.2.12 5.2.2 4.6.25	5.3.5 5.3.3	Chimie quantique ab initio

VASP

Présentation

VASP : Vienna Ab initio Simulation Package. Logiciel de chimie quantique *ab initio*.

Disponibilité

- 4.6.25
- 5.2.2
- 5.2.12
- 5.3.3
- 5.3.5 (version par défaut)

Seuls des exécutables **parallèles (MPI)** sont disponibles.

Trois exécutables sont fournis, à choisir lors de l'exécution, selon votre besoin :

- vasp** : version standard
- vasp_gamma** : version optimisée pour les calculs au point gamma, plus rapide (de 30 à 50 %) mais ne permet que des calculs au point gamma
- vasp_nc** : version pour les calculs de structures magnétiques non collinéaires et couplage spin-orbite (à activer par des mots-clés dans l'INCAR) mais est plus gourmande en mémoire.

Vous pouvez consulter la documentation sur le [site officiel de VASP](#) pour plus de renseignements.

Attention : l'accès à cette application est réservé aux utilisateurs/laboratoires **disposant d'une licence** auprès des développeurs de VASP. Nous vérifierons votre statut avant de vous donner les droits d'exécution. Contactez l'[assistance](#) de l'IDRIS pour plus d'informations.

Si vous voulez accéder aux versions 5.2 et que vous avez une licence pour les versions 4.6, vous devez acheter une nouvelle licence. La licence 5.2 ouvre également l'accès aux versions 5.3.x.

Paramètres propres au logiciel

Pseudo-potentiels

Des jeux de pseudo-potentiels PAW (version 5.2, pour les calculs en LDA et PBE, dont les pseudos pour les calculs GW) sont disponibles dans un dossier accessible via la variable d'environnement \$PSEUDO_VASP. Pour y accéder, une fois la commande module effectuée, taper simplement :

```
cd $PSEUDO_VASP
```

Vous pouvez y accéder depuis la frontale de Ada en interactif, ou en intégrant dans votre script, comme par exemple :

```
module load vasp
cd $PSEUDO_VASP/PBE/52
cat H_h/POTCAR_0_h/POTCAR > $WORKDIR/mon dossier/POTCAR
cd -
poe vasp
```

Paramètres du fichier INCAR

Les paramètres de parallélisation dans le fichier INCAR sont "très" sensibles sur Ada. Il est nécessaire d'y ajouter :

```
LPLANE = TRUE,
NPAR = valeur optimale
LSCALU = FALSE,
NSIM = 4
```

Valeur de NPAR

La valeur optimale de NPAR dépend du système étudié et du nombre de processeurs. Si vous ne mettez pas une valeur correcte, vous risquez un temps d'exécution double, voire dans le pire des cas un *segmentation fault*, un *RSPHERE error* (NPAR trop faible), ou même un calcul qui diverge. Néanmoins, voici pour vous aider les valeurs optimales obtenues pour un cas test :

Cellule de zéolithe MOR doublée et échangée 1 fois (289 atomes), FBE, 400 eV, point-F, 2 pas de géométrie :

Version	Nombre de cœurs	NPAR	Version	Nombre de cœurs	NPAR	Version	Nombre de cœurs	NPAR	Version	Nombre de cœurs	NPAR
4.6.25 standard	16	8	4.6.25 gamma	16	1	5.2.2 standard	16	4	5.2.2 gamma	16	4
	32	2		32	2		32	1		32	4
	64	4		64	4		64	4		64	2
---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

Remerciements

- Marc Baaden
- Benoist Laurent
- Jean-Marie Teuler
- Denis Girou
- Collègues de l'IDRIS

