

Utilisation optimale du code Gaussian au CINES

Le code Gaussian sera disponible sur le calculateur OCCIGEN du CINES à partir de fin Janvier 2016, voici un ensemble des règles de bonnes pratiques sur cet environnement pour obtenir à la fois les meilleurs performances et le meilleur parti de vos heures de calcul.

1- Script de lancement Slurm

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J job_name
#SBATCH --mail-type=ALL
#SBATCH --mail-user=name_user@server
#SBATCH --nodes=1 # ne pas modifier
#SBATCH --ntasks=n # n compris entre 1 et 24 cœurs.
#SBATCH --mem=1000 <MB> # par défaut 1G
#SBATCH --time=12:00:00
#SBATCH --output= nom_de_votre_fichier

# Charger le module de Gaussian
module purge
module load gaussian

# Initialisation de Gaussian
export g09root
source $g09root/g09/bsd/g09.profile
export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_NPROCS

# Création d'un dossier temporaire de calcul
export GAUSS_SCRDIR=$SCRATCHDIR/GAUSSIAN/$SLURM_JOB_NAME.$SLURM_JOBID
mkdir -p $GAUSS_SCRDIR

# Recopier vos fichiers d'entrée vers le dossier temporaire de calcul
cp -f vos_inputs $GAUSS_SCRDIR

#-----#
# Penser à recopier aussi vos fichiers (chk, rwf) s'il s'agit d'un
# redémarrage, en utilisant la commande suivante :
# cp -f vos_fichiers $GAUSS_SCRDIR
#-----#

cd $GAUSS_SCRDIR

# Quelques informations concernant votre calcul
echo "job_id : $SLURM_JOB_ID"
echo "name_job : $SLURM_JOB_NAME"
echo "nombre_nodes : $SLURM_NNODES nodes"
echo "nombre_cores : $SLURM_NPROCS cores"
echo "OMP_NUM_THREADS : $OMP_NUM_THREADS"

# Exemple de lancement de Gaussian
g09 < input.file.gjf > output.file.log
```

2- Fichier d'entrée Gaussian

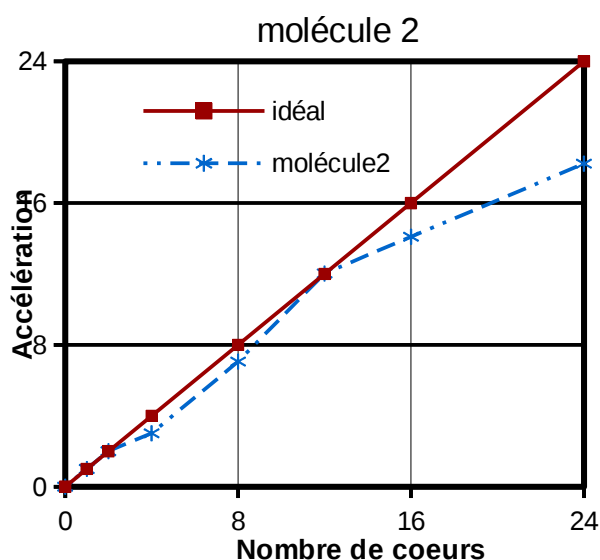
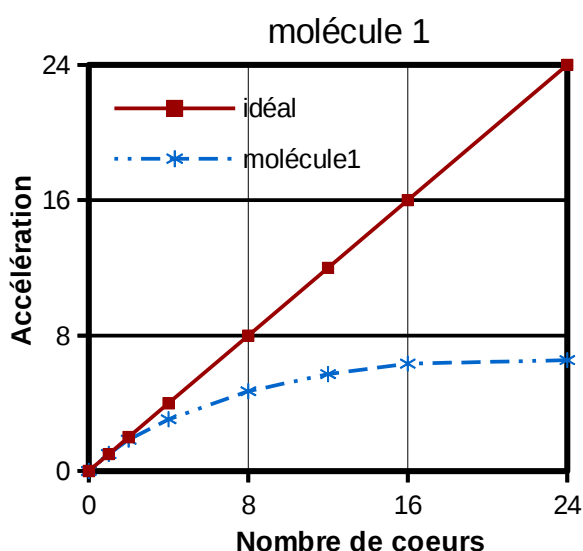
Deux paramètres Gaussian permettent l'utilisation des cœurs de calcul et de la mémoire dynamique `%NprocShared` et `%Mem`.

`%Mem` : détermine la quantité de mémoire virtuelle que Gaussian va utiliser pour les allocations dynamiques. Cette valeur dépend de votre système et la méthode utilisée. Il est vivement recommandé de valoriser ce paramètre avant de commencer vos calculs. **La valeur de ce paramètre doit être identique à la valeur figurée dans le script de lancement Slurm (cf. ci-dessus, commande `#SBATCH --mem=<MB>`).**

`%NprocShared` : doit être égal au nombre de cœurs de calcul réservés (n)

3- Performance

Les graphiques suivants présentent les performances de deux systèmes en fonction du nombre de cœurs utilisés sur la machine Occigen du CINES. Les molécules 1 et 2 sont composées de 16 et 30 atomes lourds respectivement. Le type de calcul et le système traité ont une incidence directe sur le choix du nombre de cœurs maximum, par conséquent, sur les performances de calcul. Pour cela, il est recommandé de faire des tests de performances avant de faire vos calculs.



4- Plus d'information

Cette fiche est mise en ligne sur le site du CINES :

<https://www.cines.fr/calcul/faq/> des mises à jour pourront y être apportées si nécessaire.