



I'DRIS

Numéro 4 - Mai 1997

Édito

L'évolution remarquable et soutenue de la technologie CMOS (diminution exponentielle de la taille des transistors, augmentation de la taille des circuits intégrés) débouchera sur une domination quasi-absolue du calcul intensif de haute performance à l'an 2000. IDRIS doit naturellement se préparer à une telle évolution pour profiter pleinement des avantages apportés par les nouvelles technologies.

DEUX UNIVERS DE CALCUL

Aujourd'hui, le calcul de très haute performance s'effectue à IDRIS dans deux univers différents :

- Le calcul vectoriel traditionnel sur les plateformes Cray C98/C94 dont le succès ne décline pas et qui sont saturées en permanence. Mais ces machines, en technologie bipolaire, seront remplacées avant la fin du siècle.
- Le calcul parallèle sur le Cray T3E en technologie CMOS utilisant des processeurs RISC ALPHA EV5. Il faut néanmoins observer un point essentiel : l'explosion du calcul parallèle qui atteindra très probablement la saturation à la fin de cette année n'a nullement allégé la pression sur le calcul vectoriel.

LES TENDANCES ACTUELLES

Les machines parallèles à mémoire distribuée deviennent donc quasiment inévitables car elles sont l'unique moyen connu de faire travailler efficacement et de manière concertée un grand nombre de processeurs tout en disposant d'une grosse mémoi-

re physique. L'ancienne opposition calcul vectoriel/calcul parallèle est en train de disparaître au profit des nouvelles architectures parallèles hybrides (mémoire partagée et distribuée) dotées de processeurs vectoriels puissants en technologies CMOS permettant un meilleur rapport qualité-prix/performance accompagné de coûts d'exploitation fortement réduits. Ces machines, synthèse des C98/C94 et des T3E, sont aujourd'hui très fortement poussées par les constructeurs japonais.

LE FUJITSU VPP300

IDRIS - avec l'accord de ses autorités de tutelle - a décidé d'avancer sur le chemin du calcul parallèle à grosse granularité vectorielle. L'arrivée en juin prochain d'un supercalculateur FUJITSU VPP300 répond à cette stratégie. Il s'agit d'une machine à 6 nœuds avec 2Go de mémoire et un processeur scalaire/vectoriel chacun. Selon l'application sa puissance effective avoisine 1,3 à 2 fois celle d'un processeur C90, ce qui devrait faciliter un meilleur recouvrement calcul/communication dans les programmes parallèles. La coexistence (par "time sharing") des programmes en mode monoprocesseur et en mode parallèle est l'autre aspect très séduisant de cette machine.

Nous ouvrirons donc grâce à cette nouvelle architecture une autre dimension à nos activités au service du calcul intensif. Hormis la bouffée d'oxygène qu'elle apportera au calcul vectoriel, elle permettra de développer conjointement au T3E, une expérience de calcul parallèle précieuse qui nous sera utile pour mieux cerner les propriétés des nouvelles générations de machines qui devraient investir notre site à l'horizon 2000.

V. Alessandrini

SOMMAIRE

- EDITO = P1
- Du côté de la chimie = P2 et 3

- Du côté de la Formation = P4 et 5
- NEWS = P6

Dans le numéro 1 de la Lettre de l'IDRIS, paru en janvier 1996, nous présentons un panorama des logiciels de calculs moléculaires disponibles à IDRIS.

Un an après, le moment est venu de faire le point et de présenter les nouveautés et les évolutions dans ce domaine.

A MSTERDAM DENSITY FUNCTIONAL

ADF (*Amsterdam Density Functional*) est un logiciel développé à l'université de Vrije à Amsterdam. Il s'agit d'un logiciel très général pour l'étude des structures électroniques, entièrement fondé sur l'emploi de la méthode de la fonctionnelle de la densité.

ADF peut ainsi traiter des problèmes de taille assez importante et donc s'appliquer à des domaines comme la science des matériaux ou la pharmacochimie.

ADF est disponible sur les machines vectorielles C90 (Atlas et Axis) et sur la grappe de stations scalaires (Pascal et les Blaise). Il est également disponible sur la machine parallèle CRAY T3E.

C RYSTAL95

Crystal95 est un logiciel *ab initio* pour l'étude des systèmes périodiques en dimension 0 (molécules, agrégats), 1 (polymères), 2 (lames, surfaces) et 3 (cristaux).

Il s'agit en fait de la nouvelle version du logiciel Crystal92 déjà en service à IDRIS. Cette nouvelle version apporte de nombreuses améliorations comme les méthodes de type *Density Functional Theory* et surtout la possibilité d'effectuer des calculs de type *SCF direct*.

Crystal95 est disponible sur la grappe de stations scalaires. Il est également disponible sur la T3E.

E MBED96

Embed96 est un logiciel pour l'étude des défauts dans les cristaux, fondé sur la méthode *Perturbated Cluster*. Embed96 agit dans le prolongement de Crystal95 : celui-ci donne la solution correspondant au cristal parfait et c'est sur cette base qu'Embed96 analyse les perturbations introduites par les défauts considérés.

Embed96 est disponible sur la grappe de stations scalaires.

M OLPRO

Molpro est un système complet de programmes *ab initio* pour les calculs de structure électronique.

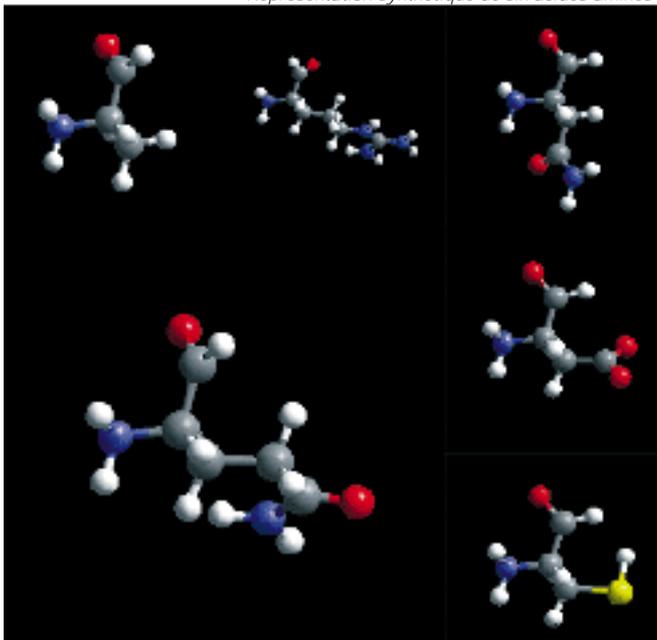
L'un des particularités de Molpro est la recherche d'une très haute précision dans les calculs portant sur les petites molécules, grâce à la prise en compte très poussée de la corrélation électronique (méthodes *Multireference*, *Multiconfiguration SCF*, *Coupled Cluster*, *full CI* etc.). Cela dit, Molpro permet également d'effectuer d'autres types de calculs sur des molécules plus importantes, par

exemple avec les méthodes de type *Density Functional Theory*.

Molpro est disponible sur les machines vectorielles CRAY C90 ainsi que sur la grappe de stations scalaires.

C ERIUS² VISUALIZER AND SOFTWARE DEVELOPMENT KIT

Représentation synthétique de six acides aminés



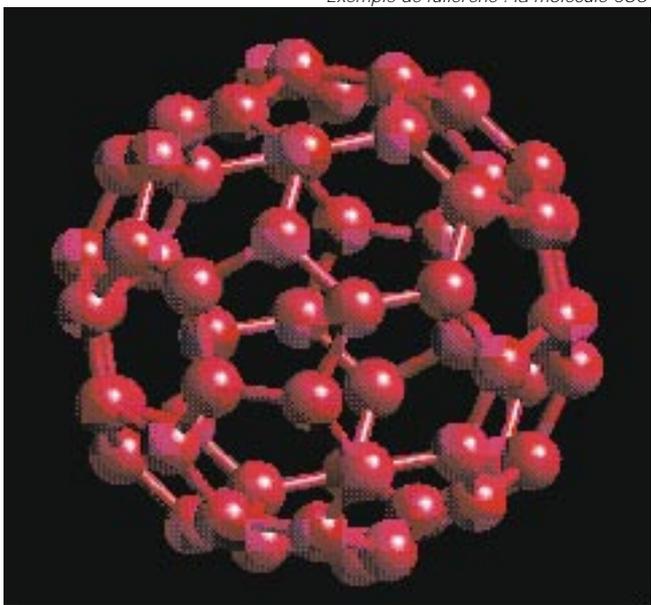
La plupart des logiciels moléculaires, qu'il s'agisse de logiciels développés dans les laboratoires ou bien de ceux qui sont installés par IDRIS, produisent un certain nombre de résultats sous forme numérique. Ceux-ci doivent être complétés par des informations graphiques dans deux situations : lorsqu'il s'agit d'interpréter les résultats obtenus et lorsqu'il s'agit de publier ces résultats (articles, posters, présentations, etc.).

Afin de pouvoir répondre à ces deux types de besoin, IDRIS s'est équipé d'un logiciel de graphisme moléculaire nommé CERIUS². Ce logiciel présente de nombreux avantages :

- il permet d'obtenir des graphiques de haute qualité, aussi bien sur écran que sur papier (les illustrations qui accompagnent cet article en sont un très bon exemple),
 - il permet d'effectuer des animations, ce qui en fait un très bon outil en amont de l'atelier vidéo d'IDRIS,
 - il est totalement automatisable et contrôlable par des scripts,
 - enfin, et c'est un point très important, toute la bibliothèque de base avec laquelle cet outil a été écrit est disponible : c'est le *Software Development Kit* ; on dispose ainsi de tout un environnement pour développer ses propres applications graphiques et on peut donc aller au-delà des fonctions offertes en standard.
- Tout en offrant le confort et la qualité d'un environnement graphique clé en main, ce produit est donc également très ouvert.

Afin de mieux évaluer tout ce que peut apporter un tel produit, nous avons décidé d'en faire pendant un an une évaluation sur projet : si vous avez des besoins précis en matière de graphisme moléculaire et que les possibilités de ce produit vous ont semblé intéressantes, vous pouvez prendre contact avec nous. Avec les équipes Visualisation et Chimie de IDRIS nous étudierons ces besoins et nous vous aiderons à mettre en place une solution adaptée. CERIOUS² est disponible sur le serveur graphique de IDRIS, Rhodes.

Exemple de fullérène : la molécule C₆₀



AUTRES LOGICIELS

Voici toutes les autres nouveautés depuis la précédente lettre de l'IDRIS.

- AMBER

La version 4.1 est disponible sur les CRAYS C90, et sur la grappe de stations IBM. Elle est également disponible sur le T3E.

- GAMESS

La version en date du 31 octobre 1996 est disponible sur la grappe de stations IBM et sur la machine parallèle CRAY T3E.

- GAUSSIAN 94

Une nouvelle version a été installée. Elle permet les traitements parallèles sur les CRAYS C90 (elle corrige un problème sérieux sur les calculs de fréquences).

- MOPAC93

Ce logiciel de type semi-empirique est disponible sur la grappe de stations IBM.

- UNICHEM

La version 4.0 de ce logiciel client-serveur (interface graphique sur station graphique et codes de calcul sur les machines vectorielles C90) est disponible sur la machine graphique Rhodes. Parmi les nombreuses innovations de cette version, notons une interface graphique très riche et conviviale pour le logiciel Gaussian94 (post-traitement et visualisation des cartes bi et tridimensionnelles).

LE CALCUL PARALLÈLE

De plus en plus de logiciels de calcul chimique sont disponibles pour des machines parallèles à mémoire distribuée comme le T3D et le T3E d'IDRIS.

L'expérience menée sur le T3D avec les logiciels Amber et Gamess, représentatifs de deux grands types de calculs chimiques, s'étant avérée très encourageante, ces logiciels ainsi que d'autres mentionnées dans cet article (ADF, CRYSTAL95) ont été installés sur le T3E. D'autres suivront, au fur et à mesure des annonces des distributeurs.

POUR EN SAVOIR PLUS

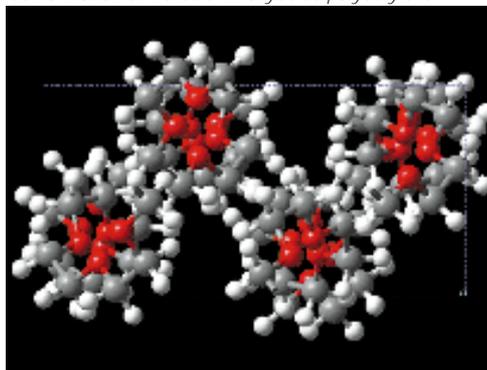
Pour en savoir plus et être tenu informé de toutes les évolutions dans ce domaine, le plus simple est de consulter les pages Chimie du serveur Web IDRIS (qui sont mises à jour régulièrement, au fur et à mesure des nouvelles acquisitions et installations).

À partir de la page d'accueil (dont l'URL est <http://www.idris.fr/>), sélectionnez les rubriques **Assistance utilisateurs** puis **Chimie**. Par ailleurs, la rubrique **Tout ce qui est nouveau à IDRIS** mentionne les dernières nouveautés.

Pour la plupart des logiciels mentionnés ici, une note technique en décrivant l'utilisation à IDRIS est disponible. Là encore, on trouvera sur le serveur Web la liste de ces notes techniques.

J. M. Teuler

Conformation en hélice d'un oxyde de polyéthylène



Depuis sa création en 1993, IDRIS dispense des formations générales (langages, systèmes) ou très spécialisées (logiciels ou outils spécifiques) destinées à faciliter l'utilisation de ses moyens matériels et logiciels. Elles sont ouvertes gratuitement aux personnels du CNRS et de l'Éducation Nationale. En 1996, sur un total de 43 cours programmés, 21 ont été réalisés à IDRIS et 5 en province à la demande de laboratoires.

La réorganisation de ces formations en de nouvelles filières modulaires et plus souples s'est avérée nécessaire pour un certain nombre de raisons évoquées ci-après. Elle ne concerne que les cours relatifs à l'utilisation des machines vectorielles ou parallèles. Par ailleurs, de nouvelles modalités d'inscription nous permettent désormais d'ouvrir plus largement nos cours vers l'extérieur et ainsi de les réaliser plus régulièrement.

POURQUOI CETTE RÉORGANISATION ?

- Outre l'habituelle évolution rapide des matériels et logiciels, l'arrivée prévue d'une machine VPP Fujitsu hybride (à la fois parallèle et vectorielle) est venue *jeter le trouble* sur la séparation jusque là bien nette entre la plate-forme vectorielle (CRAY C98/C94) et la plate-forme parallèle (CRAY T3D/T3E).

Une refonte complète des filières de formation vectorielle et parallèle s'imposait. Au-delà de l'habituel élagage des aspects obsolètes et de la prise en compte des nouveautés, leur découpage en entités plus courtes et optionnelles permet d'extraire et de regrouper au sein de modules *généraux* les parties communes à plusieurs plates-formes alors que tout ce qui est spécifique est regroupé dans des modules *spécialisés*.

Pour la plupart, les utilisateurs de la nouvelle machine VPP seront probablement aussi ceux de la plate-forme vectorielle ou ceux de la plate-forme parallèle. A condition de respecter les pré-requis

recommandés, ils pourront ainsi, s'ils le souhaitent, faire l'impasse des modules généraux en se contentant de suivre ceux qui sont spécifiques de la nouvelle machine VPP.

En dehors de ces deux filières profondément réorganisées, nous avons conservé tels quels les cours généraux sur les langages et les logiciels ainsi que ceux qui concernent la visualisation.

- En 1996, faute d'un nombre suffisant d'inscrits, nous avons dû annuler 17 sessions de cours (sans parler d'un pourcentage moyen d'absences non justifiées de 25%) ! Pour éviter ces annulations toujours désagréables pour ceux qui les subissent, nous avons d'une part élargi et diversifié la base des personnes susceptibles de s'inscrire et d'autre part diminué les risques de non-inscription ou de non-assiduité liés à la difficulté pour certains utilisateurs de s'absenter trop longtemps pour suivre un cours de plus de 2 jours.

Les contraintes de durée devraient être partiellement résolues du fait de la réorganisation en modules courts et optionnels alors que l'élargissement de la base potentielle d'inscription a été obtenue en référant certains de nos cours dans le catalogue de CNRSFormation (cours payants destinés aux industriels) et celui de la Formation Permanente de la délégation régionale du CNRS.

Le schéma décrit la nouvelle organisation des modules définis au sein de la filière parallèle. Chaque case représente un module d'une journée. Reportez-vous au tableau général des modules pour le titre explicite et la date de la première session.

La mise en place de cette réorganisation se fera progressivement d'ici la fin 1997. En attendant, pour plus de détails, consultez notre serveur Web (http://www.idris.fr/su/Cours/Page_generale.html) et en particulier le "Plan de formation IDRIS" disponible aussi auprès de notre service de documentation (01 69 35 84 84/84 85).

A F O R M A T I O N

Organisation des modules de la filière parallèle de l'IDRIS

Schéma : modules parallèles Cray T3E et VPP Fujitsu

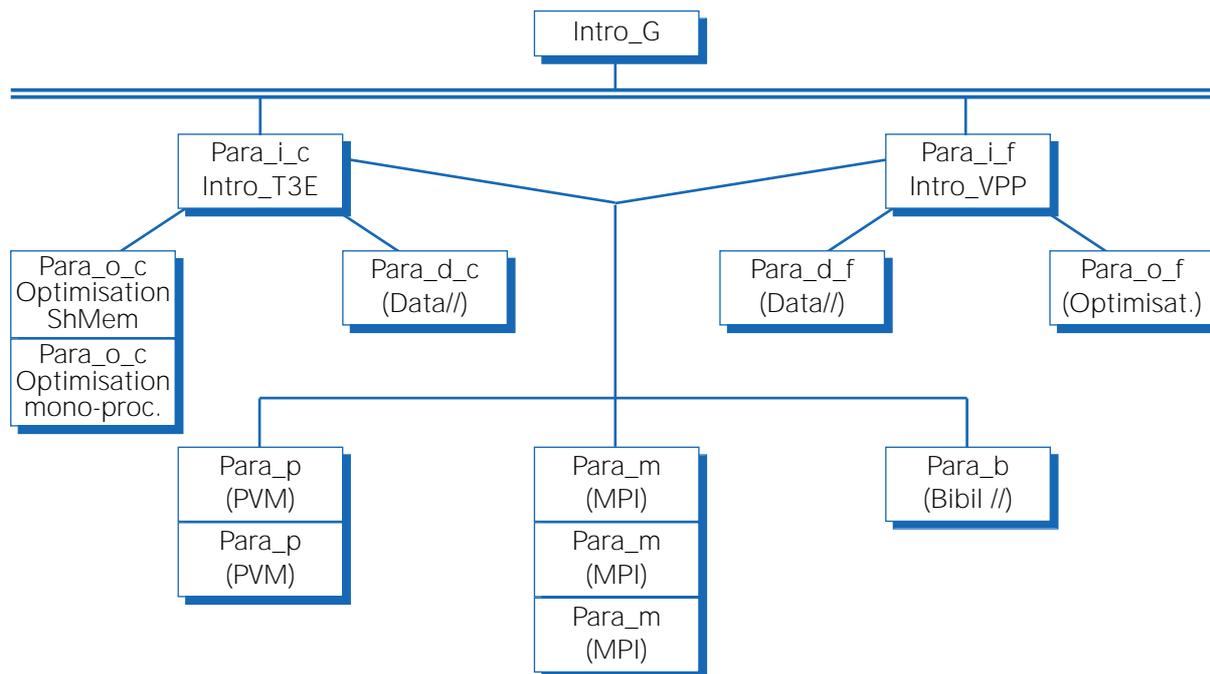


Tableau général des modules de formation (prochaines sessions)

| Code | Durée | Intitulé | Date |
|-----------|-------|--|--------------|
| Intro_G | 1 | Introduction générale à l'IDRIS | 29-09-97 |
| Opt_Vect | 1/2 | Optimisation et vectorisation (C90 et VPP) | 30-09-97 |
| Comp_Bib | 1/2 | Compilation, chargement, bibliothèques scientifi. (C90 et VPP) | 30-09-97 |
| Ana_Debog | 1 | Outils d'analyse et de débogage (C90 et VPP) | 01-10-97 |
| Para_i_c | 1 | Calcul parallèle : introduction Cray T3E | 20-10-97 |
| Para_i_f | 1 | Calcul parallèle : introduction Fujitsu VPP | à fixer |
| Para_p | 2 | Calcul parallèle : PVM | 07-10-97 |
| Para_m | 3 | Calcul parallèle : MPI | 15-10-97 |
| Para_o_c | 2 | Calcul parallèle : optimisation Cray T3E | 21-10-97 |
| Para_o_f | 1 | Calcul parallèle : optimisation Fujitsu VPP | à fixer |
| Para_b | 1 | Calcul parallèle : bibliothèques scientifiques parallèles | à fixer |
| Para_d_c | 1 | Calcul parallèle : parallélisme de données Cray T3E | à fixer |
| Para_d_f | 1 | Calcul parallèle : parallélisme de données Fujitsu VPP | à fixer |
| F90 | 3 | Langage Fortran 90 | 11-06-97 |
| C | 5 | Langage C | 23-06-97 |
| C++ | 2 | Applications scientifiques de C++ | 09-06-97 |
| Gauss. | 2 | Gaussian : logiciel de chimie | 29-05-97 |
| Unix | 2 | Unix : concepts, administration et sécurité | 05-11-97 |
| IG | 2 | Visualisation : module Introduction/Serveur | 30-09-97 |
| AVS1 | 3 | Visualisation : module AVS de base | 22-09-97 |
| AVS 2 | 2 | Visualisation : module AVS avancé | 12-11-97 |
| UNicar | 1 | Visualisation : module UNIRAS/NCAR | à la demande |



Nouvelles du Centre

La direction et tout le personnel IDRIS s'associent pour féliciter M. Jean-Marie Teuler, coordinateur des activités Chimie des utilisateurs IDRIS et consultant auprès du Département Des Sciences Chimiques du CNRS (DSC) qui a été honoré du Cristal du CNRS par son travail d'accompagnement de

la recherche au sein de la communauté Chimie et qui participe ainsi au rayonnement du CNRS. Cette distinction lui sera remise à l'IDRIS par M. Jean-Jacques Gagnepain, Directeur Scientifique SPI, lors d'une cérémonie qui se tiendra le jeudi 12 juin à partir de 17 heures.



Renseignements pratiques

Qui joindre à l'IDRIS :

La direction 01 69 35 85 85
et dir@idris.fr

Le secrétariat 01 69 35 85 05/85 01
et secretariat@idris.fr

L'assistance 01 69 35 85 55
et assist@idris.fr

Le pupitre 01 69 35 85 30
Par télécopie 01 69 85 37 75



Serveur Web de l'IDRIS (<http://www.idris.fr>)

Vous y trouverez toutes les informations utiles concernant IDRIS, les cours, des documentations et des FAQ's sur l'utilisation des différentes machines de l'institut.

Vous pouvez désormais y consulter "La lettre de l'IDRIS à l'adresse

http://www.idris.fr:8079/docs/journal/Page_generale.html



Documentation et Publications IDRIS

Liste des notes techniques disponibles :

- NT 24 Utilisation de Molpro à l'IDRIS
- NT 23 Utilisation d'Embed à l'IDRIS
- NT 22 Utilisation de Crystal à l'IDRIS
- NT 21 Introduction au T3E d'IDRIS : Aleph



Nouvelles publications IDRIS disponibles

MPI en décomposition de domaine

Étude du rapport des performances entre le T3E et le T3D

 CENTRE NATIONAL
DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



Directeur de la Publication

Victor Alessandrini

Rédacteur en chef

Thierry Goldmann

Merci de photocopier et de renvoyer cette demande à :
IDRIS - Bat. 506 - B.P. 167 - 91403 ORSAY CEDEX - FRANCE

Je souhaite recevoir La Lettre de l'IDRIS J'ai déjà un login à l'IDRIS Je n'ai pas de login à l'IDRIS

Nom : Prénom : Fonction :

Organisme :

Adresse :

Code Postal : Ville : Pays :

Tél : Fax :