

Modélisation des verres : de la structure aux propriétés

TP n° 3 : Prise en main du code CPMD

1. Objectif du TP

Le but de cette séance de TP est de tester le fonctionnement d'un programme de dynamique moléculaire *ab initio*, plus précisément le code CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics). CPMD est sous licence IBM Zürich (Suisse)/Max Planck Institut (Allemagne), et il est distribué gratuitement aux institutions à but non-lucratif. On peut le télécharger à l'adresse suivante: <http://www.cpmc.org>. les temps de calculs étant beaucoup plus long que pour les TP de dynamique moléculaire classique, il est maintenant nécessaire d'utiliser des clusters de calcul. L'avant dernière version du code CPMD, la 3.13.2, a été compilée sur les nœuds Intel du centre HPC@LR de Montpellier.

2. Connexion sur le calculateur HPC@LR

Chacun d'entre vous dispose d'un compte dont le nom est représenté par votre nom de famille suivi de l'initiale de votre prénom, par exemple `charpentiert` pour Charpentier Thibault, `ispas` pour Ispas Simona, `salannem` pour Salanne Mathieu

Pour vous connecter à distance sur le calculateur HPC@LR, vous devrez utiliser la commande `ssh` (secure shell):

```
> ssh nomp@login.hpclr.univ-montp2.fr
```

Lors de votre première connexion, vous utiliserez le mot de passe qui vous sera communiqué. Celui-ci devra immédiatement et **impérativement** être modifié, en utilisant la commande `passwd`. Le nouveau mot de passe doit contenir au moins 6 caractères, avec au minimum une majuscule et un chiffre.

3. Echanger des données entre le calculateur et un ordinateur local

Les copies de fichier se font à l'aide de la commande `scp` (secure copy), qui a un fonctionnement très similaire à celui de `cp`:

- Pour copier un fichier `toto.dat` depuis l'ordinateur local vers le calculateur (dans le répertoire `EXEMPLE`):

```
> scp toto.dat nomp@login.hpclr.univ-montp2.fr:~/EXEMPLE
```
- Pour copier un fichier `toto.dat` depuis le sous-répertoire `EXEMPLE/TEST1` vers l'ordinateur local:

```
> scp nomp@login.hpclr.univ-montp2.fr:~/EXEMPLE/TEST1/toto.dat .
```

Pour chaque copie, le mot de passe sera demandé.

4. Déroulement du TP

Sur le calculateur, chaque utilisateur a accès à deux dossiers différents dont les chemins sont `/home/nomp` et `/scratch/nomp`. Le premier sert à stocker les données (input/output) tandis que le second sera uniquement utilisé lors des calculs.

Verre modélisé : Le système étudié est le même qu'en dynamique moléculaire classique, c'est-à-dire un verre de composition $\text{Na}_2\text{O}-2\text{SiO}_2$. Mais la structure initiale ne contient que 90 atomes (la densité est de 2,488), et elle a été obtenue en effectuant une trempe en DM classique.

A. Fichier d'entrée pour le code CPMD

Vous commencerez donc par vous placer dans le dossier de calcul, dans lequel il faut copier le premier fichier input:

```
> cd /scratch/nomp
```

Créer éventuellement un sous-dossier appelé par exemple **cpmd** :

```
> mkdir cpmd
```

```
> cd cpmd
```

Copier le fichier input nécessaire au lancement du code CPMD :

```
> cp /home/salannem/inputs/ns2-glass-90at-wf.in .
```

Éditer le fichier `ns2-glass-90at-wf.in`. L'éditeur de texte `gedit` n'étant pas disponible sur le calculateur, cette opération (ainsi que toutes les opérations nécessitant de regarder ou de modifier un fichier) se fera plus aisément sur votre ordinateur local (cf **3.** pour la commande permettant de faire les transferts). Ce fichier comprend plusieurs sections:

- Une section comprenant des informations relatives au système (cette section n'est pas utilisée par le programme)

```
&INFO
```

```
....
```

```
&END
```

- Une section comprenant les instructions concernant le calcul à réaliser. Dans ce premier cas, les instructions sont celles permettant de faire une optimisation de fonction d'onde (calcul de l'état fondamental), première étape nécessaire avant de lancer tout autre calcul (optimisation de géométrie, dynamique moléculaire, réponse linéaire...).

```
&CPMD
```

```
OPTIMIZE WAVEFUNCTION
```

```
....
```

```
....
```

```
&END
```

- Une section comprenant les paramètres correspondant au système étudié (géométrie de la boîte, énergie de coupure):

```
&SYSTEM
```

```
...
```

```
&END
```

- Une section comprenant les informations sur les types d'atomes, leurs positions initiales et le nom du fichier de pseudopotentiel à utiliser:

```
&ATOMS
```

```
....
```

```
&END
```

Les fichiers de pseudopotentiels sont tous regroupés dans le répertoire `/work/mspv/pseudo/`; il n'est pas nécessaire de les déplacer, mais vous pouvez vérifier qu'ils sont bien présents (`Si_SG_BLYP.psp`, `O_MT_BLYP.psp` et `Na_MT9e_FMauri_BLYP.psp`)

- Et enfin une section comprenant les informations concernant la fonctionnelle utilisée:

```
&DFT
```

```
...
```

```
&END
```

Pour plus de détail sur les mots-clé utilisés, vous pouvez vous référer au manuel de CPMD, qui se trouve dans `/work/mspv/doc/` ou sur le site web.

B. Calcul de l'état fondamental

Le lancement des calculs se fait via un script, que l'on récupèrera au même endroit:

```
> cp /home/salannem/inputs/job-cpmd-model.cmd .
```

Éditer le script; il faut modifier l'adresse mail qui recevra les notifications (le calculateur envoie un mail lorsqu'un calcul démarre ou se termine).

Il faut alors utiliser la commande `llsubmit`:

```
> llsubmit job-cpmd-model.cmd
```

Le fichier de sortie de ce calcul se nomme `output-ns2-wf.01`. Vous pouvez suivre le déroulement du calcul à l'aide de la commande `tail` (une fois cette commande exécutée, il faut taper Contrôle-C pour récupérer la main):

```
> tail -f output-ns2-wf.01
```

Une fois le calcul terminé, recopier tous les fichiers de sortie vers le répertoire de stockage (de préférence dans un répertoire préalablement créé, par exemple NS2 ici):

```
> cp * /work/nomp/NS2
```

En plus du fichier `output-ns2-wf.01`, le programme a créé quatre autres fichiers qui lui serviront à redémarrer (`GEOMETRY`, `GEOMETRY.xyz`, `LATEST` et `RESTART.1`) – Attention: Ne pas copier le fichier `RESTART.1` sur votre ordinateur local car il contient la fonction d'onde, le transfert serait beaucoup trop long. De plus c'est un fichier binaire, donc inutilisable sur une architecture différente de celle du calculateur qui l'a généré.

C. Effectuer une simulation de dynamique moléculaire CP

Vous pouvez maintenant effectuer une dynamique moléculaire. pour cela copier le second fichier input:

```
> cp /home/salannem/inputs/ns2-glass-90at-md.in .
```

Éditer ce fichier. Il ne diffère du premier que dans la section `&CPMD`; toutes les valeurs (masse fictive, pas de temps) sont données en unités atomiques.

Pour lancer le calcul, il faut modifier le script `job-cpmd-model.cmd`: Les noms des fichiers input et output doivent être modifiés (mettre `md` à la place de `wf` dans les deux cas). Ensuite la procédure est similaire à précédemment.

Une fois le calcul terminé, vous récupèrez deux nouveaux fichiers outputs, `ENERGIES` et `TRAJEC.xyz`.

- La trajectoire peut être visualisée à l'aide du code `vmd`.
- Le fichier `ENERGIES` contient plusieurs colonnes, correspondant respectivement à l'énergie cinétique des électrons `EKINC`, la température du système classique (noyaux uniquement) `TEMPP`, l'énergie potentielle (énergie de Kohn-Sham) `EKS`, l'énergie totale du système classique `ECLASSIC`, l'énergie totale du système complet (noyaux + électrons), le déplacement carré total `DIS` et le temps de calcul `TCPU`. Tracer ces diverses quantités à l'aide de `xmgrace`: Qu'observez vous?

La simulation pourra éventuellement être continuée. Pour cela, il n'y a qu'une seule modification à faire: Dans la section `&CPMD`, la ligne commençant par `RESTART` doit être remplacée par `RESTART ALL LATEST`.