

HONPAS 合肥线性标度从头模拟软件包简介

一、软件介绍

传统基于密度泛函理论的电子结构方法的计算复杂度通常与体系大小的三次方成正比（立方标度），因此难以有效利用日益增长的计算能力来处理复杂大体系。线性标度方法以量子力学的局域性（Kohn“近似”原理）为物理基础，通过实空间局域的基函数来线性标度求解稀疏的密度矩阵或瓦尼尔函数，是结合高性能并行快速实现复杂大体系电子结构计算的有效途径。中国科学技术大学杨金龙院士课题组多年来致力于在数值原子轨道基组下独立发展和实现更先进、更有效、功能更全面并且适合于高性能计算的线性标度计算方法，开发了一款线性标度电子结构计算软件包HONPAS（Hefei Order-N packages for ab initio simulations, 合肥线性标度从头模拟软件包，版权注册号：2019SR1267056）。

该软件目前基于流行的SIESTA（版本3.2）软件，采用了标准的模守恒赝势、严格局域的数值原子轨道基组以及周期边界条件。相比于SIESTA，HONPAS具有多个独立的线性标度电子结构计算模块（如图1所示），包括杂化泛函线性标度计算、密度矩阵纯化（PM）线性标度计算、自洽后（post-SCF）边界态和最大局域瓦尼尔函数（MLWFs）等的线性标度计算、密度矩阵微扰理论（DMPT）线性标度计算和post-Hartree-Fock低标度计算。

其中，HONPAS最主要的特色功能是通过线性标度算法和高性能并行实现上千原子大体系的杂化泛函电子结构计算。该模块采用NAO2GTO方案（辅助的高斯基组拟合数值原子轨道）来快速解析地计算双电子积分，然后通过多种积分预筛选方法实现杂化泛函中精确Hartree-Fock交换项的线性标度计算，最后再结

合两级Master-Worker动态并行策略实现高性能并行。基于NAO2GTO方案的杂化泛函线性标度并行计算可以用于快速估计复杂半导体体系的能隙,并快速模拟极性晶体中的极化子效应以及生物大分子、量子点、表面和纳米材料等复杂大体系的基态杂化泛函电子性质。

除了快速杂化泛函计算, HONPAS也可以采用密度矩阵纯化线性标度算法来求解密度矩阵,并快速得到边界态和最大瓦尼尔函数,用于研究复杂半导体吸附和掺杂后的电子性质。并且,基于密度矩阵微扰理论线性标度方法,它也可以快速模拟周期半导体体系的响应性质,如极化率、声子等。此外,在NAO2GTO计算双电子积分的基础上,它还可以对周期体系实现二阶Møller-Plesset微扰理论(MP2)的低标度计算,用于计算分子和固体体系的相关能并研究固体表面的分子吸附性质等。

Hefei Order- N Packages for *Ab initio* Simulations

International Journal of
QUANTUM
CHEMISTRY

WWW.QCHEM.ORG

SOFTWARE NEWS & UPDATES

<http://honpas.ustc.edu.cn/>

HONPAS: A Linear Scaling Open-Source Solution for Large System Simulations

Xinming Qin,^[a] Honghui Shang,^[a] Hongjun Xiang,^[a] Zhenyu Li,^[a,b] and Jinlong Yang^{*,[a,b]}

针对非金属体系, 线性标度计算模块

- ✓ 杂化泛函线性标度计算
- ✓ 密度矩阵纯化线性标度计算
- ✓ 自洽后 (post-SCF) 线性标度计算
- ✓ 密度矩阵微扰理论线性标度计算
- ✓ post-Hartree-Fock 低标度计算

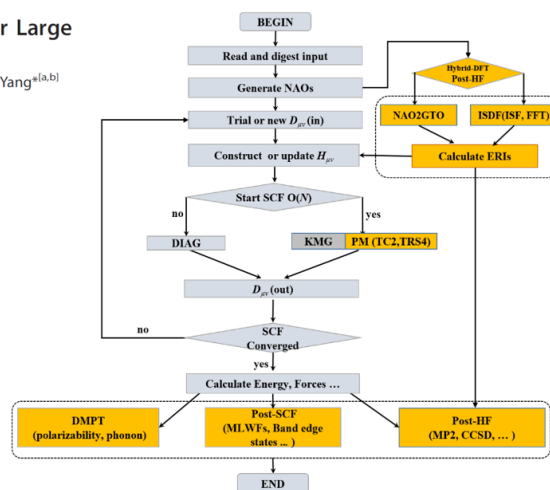


图1: 合肥线性标度从头模拟软件包HONPAS

二、软件功能

PWDFFT采用平面波基组、模守恒赝势（HGH或ONCV赝势）以及周期性边界条件，能够采用CPU-GPU异构并行快速实现对分子和固体体系的基态和激发态电子结构的计算，其能够采用GPU加速的计算功能包括：

2.1 基本功能

1. 基态能量与原子力

能量、原子力、应力张量

2. 交换关联泛函

LDA、GGA、DFT+U

3. 结构优化

晶格与原子弛豫

4. 分子动力学（从头分子动力学模拟）

5. 基态电子结构（电荷密度、能带结构、波函数、态密度等）

6. 低标度算法（KMG 线性标度算法、PEXSI 算法）

7. 磁性性质（共线自旋计划、旋轨耦合）

8. 声子（有限元冻声子方法）

2.2 特色功能

1. 杂化泛函线性标度计算

杂化泛函电子结构与从头分子动力学模拟

2. 密度矩阵纯化线性标度计算

TC2、自旋极化 (PSUTC2、SUTC2)

3. 自洽后线性标度计算

最局域化瓦尼尔函数、边界态、杂质态等

4. 密度矩阵微扰理论 (DMPT) 线性标度计算

声子、极化率、Born 有效电荷等

5. Post-Hartree-Fock 低标度计算

MP2 相关能

三、测试数据

测试目的

通过对不同大小超胞固体硅杂化泛函 HSE06 自洽+原子力计算，分析软件做杂化泛函计算的性能。

测试条件

硬件	软件	测试内容
CPU: Intel (R) Xeon (R) CPU E5-2680v3 2.5GHz, 24 核; 内存 64GB	HONPAS	不同大小超胞固体硅杂化泛函 HSE06 自洽+原子力计算

测试结果

计算体系	计算资源	HONPAS用时 (秒)			平面波软件用时 (秒)
		SZ基组	DZ基组	DZP基组	400eV截断能
8 硅原子 5 × 5 × 5 K点	1节点 24 核	33	236	499	1017
64 硅原子 3 × 3 × 3 K点	1节点 24 核	206	1773	3869	10471
216 硅原子 2 × 2 × 2 K点	2 节点 48 核	472	3839	9109	37813
512 硅原子 单Gamma点	3节点 72 核	694	5733	16272	内存不足
1000 硅原子 单Gamma点	4节点 96 核	1077	9536	20043	内存不足

表 0-1 HSE06 杂化泛函静态计算

与常用的平面波软件进行的杂化泛函计算性能做对比，结果显示 HONPAS 比平面波方法快 1-2 个量级，更重要的是，它只需要使用很小的计算资源即可实现上千原子大体系的杂化泛函计算，快速预测大体系的基态电子性质。

四、软件相关论文

如果想了解更多的关于 HONPAS 的方法和程序，请参考以下文献：

引用 HONPAS:

Xinming Qin, Honghui Shang, Hongjun Xiang, Zhenyu Li, Jinlong Yang*, HONPAS : A linear scaling open-source solution for large system simulations, *Int. J. Quantum Chem.* **115**, 647 (2015) .

综述:

Honghui Shang, Hongjun Xiang, Zhenyu Li, Jinlong Yang*, Linear scaling electronic structure calculations with numerical atomic basis set, *Int. Rev. Phys. Chem.* **29**, 665 (2010).

密度矩阵纯化方法:

Zhaolong Luo, Xinming Qin*, Lingyun Wan, Wei Hu*, Jinlong Yang, Parallel implementation of large-scale linear scaling density functional theory calculations with numerical atomic orbitals in HONPAS, *Front. Chem.* **8**, 932 (2020).

Hongjun Xiang, Wanzhen Liang, Jinlong Yang*, Jianguo Hou, Qingshi Zhu, Spin-unrestricted linear-scaling electronic structure theory and its application to magnetic carbon-doped boron nitride nanotubes, *J. Chem. Phys.* **123**, 124105 (2005).

后处理方法:

Hongjun Xiang, Jinlong Yang*, Jianguo Hou, Qingshi Zhu, Linear scaling calculation of band edge states and doped semiconductors, *J. Chem. Phys.* **126**, 244707 (2007).

Hongjun Xiang, Zhenyu Li, Wanzhen Liang, Jinlong Yang*, Jianguo Hou, Qingshi Zhu, Linear scaling calculation of maximally localized Wannier functions with atomic basis set, *J. Chem. Phys.* **124**, 234108 (2006).

密度矩阵微扰理论:

Hongjun Xiang, Jinlong Yang*, Jianguo Hou, Qingshi Zhu, Linear-scaling density matrix perturbation treatment of electric fields in solids, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 266042 (2006).

杂化泛函:

Xinming Qin, Jie Liu, Wei Hu*, Jinlong Yang*, Interpolative separable density fitting decomposition for accelerating Hartree-Fock exchange calculations within numerical atomic orbitals, *J. Phys. Chem. A* **124**, 5664 (2020).

Xinming Qin, Jielan Li, Wei Hu*, Jinlong Yang*, Machine learning k-means clustering

algorithm for interpolative separable density fitting to accelerate hybrid functional calculations with numerical atomic orbitals, *J. Phys. Chem. A* **124**, 10066 (2020).

Honghui Shang*, Lei Xu, Baodong Wu, Xinming Qin, Yunquan Zhang, Jinlong Yang, The dynamic parallel distribution algorithm for hybrid density-functional calculations in HONPAS package, *Comput. Phys. Comm.* **254**, 107204 (2020).

Xinming Qin, Honghui Shang*, Lei Xu, Wei Hu, Jinlong Yang, Shigang Li, Yunquan Zhang, The static parallel distribution algorithms for hybrid density-functional calculations in HONPAS package, *Int. J. High Perform. Comput. Appl.* **34**, 159 (2020).

Wei Hu, Yi Huang, Xinming Qin, Lin Lin*, Erjun Kan, Xingxing Li, Chao Yang*, Jinlong Yang*, Room-temperature magnetism and tunable energy gaps in edge-passivated zigzag graphene quantum dots, *npj. 2D. Mater. Appl.* **3**, 17 (2019).

Honghui Shang, Zhenyu Li, Jinlong Yang*, Implementation of screened hybrid density functional for periodic systems with numerical atomic orbitals: Basis function fitting and integral screening, *J. Chem. Phys.* **135**, 034110 (2011).

Honghui Shang, Zhenyu Li, Jinlong Yang*, Implementation of exact exchange with numerical atomic orbitals, *J. Phys. Chem. A* **2**, 114 (2010).

Post-Hartree-Fock 方法:

Honghui Shang*, Jinlong Yang*, Implementation of Laplace transformed MP2 for periodic systems with numerical atomic orbitals, *Front. Chem.* **8**, 956 (2020).

五、开发者信息

- 开发人：杨金龙、向红军、商红慧、胡伟、秦新明等
- 开发单位：中国科学技术大学
- 编程语言：Fortran
- 开源类型：开源
- 版本：1.0
- 邮箱：xmqin03@ustc.edu.cn