

PWDFT 平面波基组密度泛函理论软件简介

一、软件介绍

PWDFT (Plane Wave Density Functional Theory) 是一款基于平面波基组的密度泛函理论计算软件。PWDFT主要通过求解Kohn-Sham方程实现固体材料和分子体系的电子结构计算和第一性原理分子动力学模拟。它与VASP、Quantum ESPRESSO和ABINIT等软件是同类软件, 并且具有完全相同的计算精度。PWDFT使用C/C++语言编写, 结合CPU-MPI和GPU-CUDA异构并行框架实现高性能计算。PWDFT主要致力于实现数百到上千原子的大体系的密度泛函理论计算。目前支持单Gamma点(不支持多k点计算)、不考虑电子自旋的密度泛函理论计算, 可以提供计算体系的总能量、能级、电子密度、态密度、原子力、结构优化激发态电子结构、基态和激发态动力学等重要信息。

PWDFT作为第一性原理模拟软件具有以下优势:

1. 新型第一性原理计算开发平台: PWDFT集成了最新的第一性原理加速算法, 包括LOBPCG/PPCG本征值迭代算法、ACE、PC-DIIS和ISDF等加速算法, 使得用PWDFT-DCU做大体系杂化密度泛函计算比已有算法快100倍。
2. CPU-DCU异构加速: PWDFT支持CPU-GPU异构加速, 现在可以同时兼容NVIDIA-CUDA和AMD-HIP (DCU) 平台。PWDFT的GPU优化程度比VASP的GPU版本更高, 比VASP快了一个数量级以上。
3. 世界领先的扩展性能: 由于PWDFT-DCU本身优秀的并程序架构设计, PWDFT具有非常好的扩展性能, 这在平面波基组的第一性原理软件中

名列前茅。行业内使用最广泛的VASP只能做到数百原子数百核并行，而PWDFT可以做到8000原子25000 CPU核并行，在GPU版本也可以并行到上千块卡。

二、软件功能

PWDFT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. 基态的电子结构计算

能量、原子力、电荷密度

2. 交换关联泛函

LDA、GGA、HSE06

3. 几何优化

原子弛豫

4. 高性能计算

5. 激发态电子结构计算

2.2 特色功能

1. 激发态的电子结构计算

含时密度泛函理论 TDDFT，线性响应的含时密度理论 LR-TDDFT

2. GW 计算

格林函数与屏蔽相互作用的自能展开，利用多体微扰理论进行激发态计算

3. CPU-GPU 异构并行加速计算

采用 MATLAB，GPU 加速功能，调用 CUDA 进行图形处理器计算

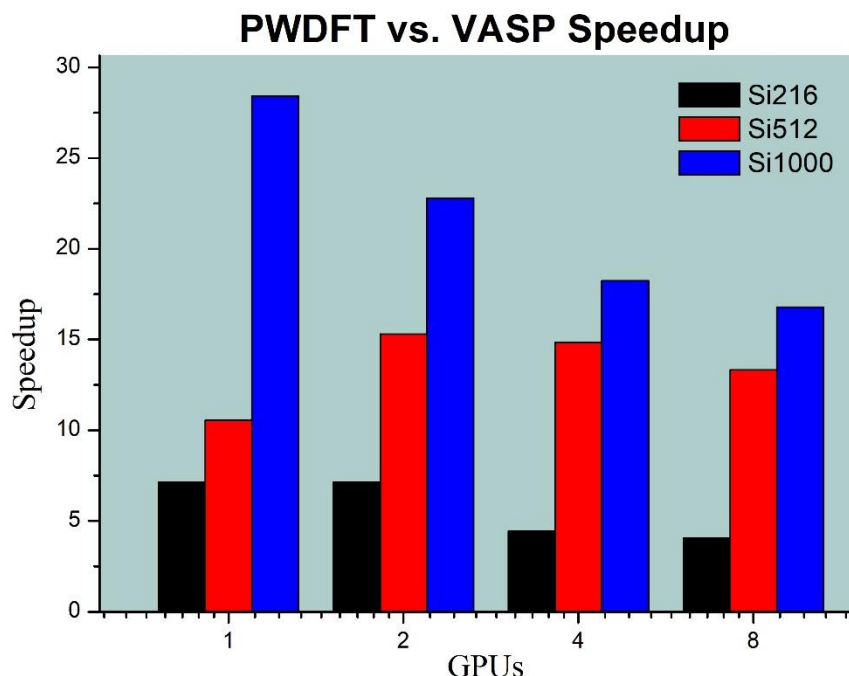
4. 独创的杂化泛函加速算法计算功能

ACE（自适应压缩交换算符）、ISDF（插值可分密度拟合）、PC-DIIS（投影子空间迭代求逆）

三、测试数据

1. 与 VASP 对比计算速度

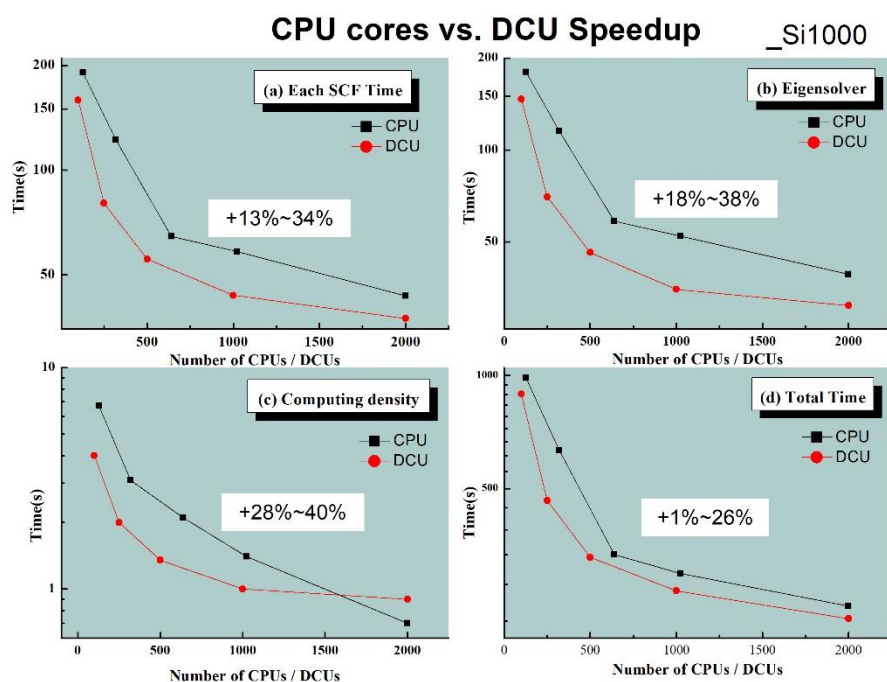
为了跟同类软件对比，我们测试了 PWDFT 和 VASP 的 GPU 版本在相同硬件 NVIDIA Tesla V100 32GB 的计算速度，测试体系为包括 Si216 (Ecut=10 Hartree)、Si512 (Ecut=10 Hartree) 和 Si1000 (Ecut=5 Hartree)。测试结果如下图所示。



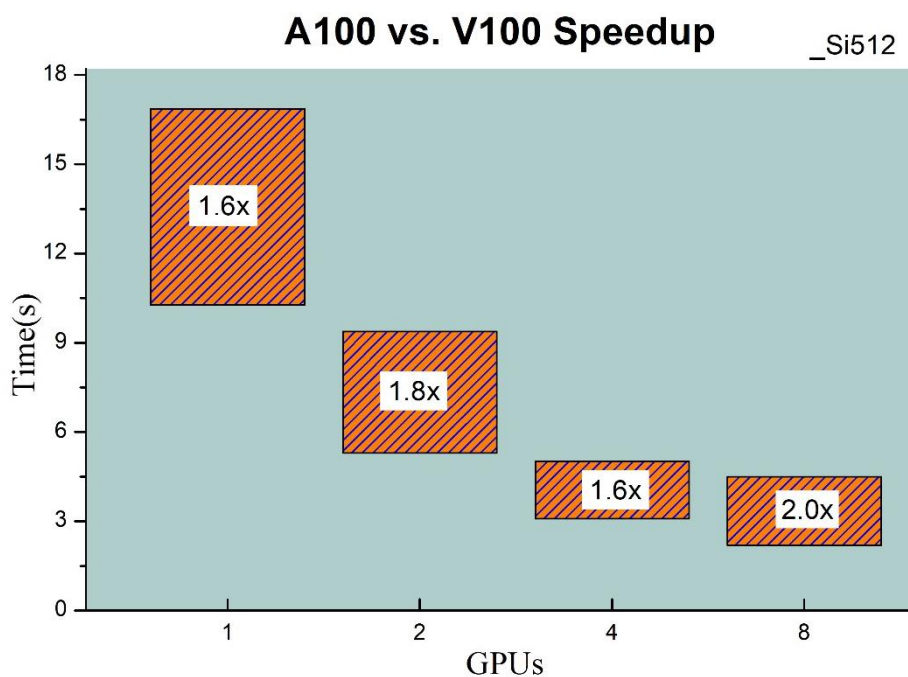
可以看到，不论是单卡还是多卡测试，PWDFT 都比 VASP 的速度快 5-30 倍。这表明 PWDFT 相比同类软件更强的加速卡优化性能。另外，我们也可以看到，随着计算体系越大，PWDFT 软件先比于 VASP 的加速比优势更明显。

2. 并行可扩展性

测试体系 Si1000 (CPU ENCUT=10 Ha; DCU ENCUT=20)



上图分别展示了 PWDFT 在 CPU 和加速卡上的扩展性能，可以看到无论是 CPU 还是加速卡，在 2000 核/卡都保持很好的扩展性能。DCU 加速卡相对于 CPU 的加速比在 10%-40% 左右。



3. NVIDIA 产品性能对比

测试体系：Si512

为了比较 NVIDIA 产品的计算性能，我们分别在 NVIDIA Tesla V100 及 A100 上运行了 PWDFT，测试了平均一步 SCF 计算所需要的时间。从上图中，我们看到 A100 相对于 V100 计算速度可提高 60%-80%，并且不论是 A100 还是 V100 我们都可以轻松计算 500 多个原子以上的体系

四、软件相关论文

如果想了解更多的关于 PWDFT-DCU 的方法和程序，请参考以下文献：

1. Wei Hu, Lin Lin, Amartya S. Banerjee, Eugene Vecharynski and Chao Yang, Adaptively compressed exchange operator for large scale hybrid density functional calculations with applications to the adsorption of water on silicene, *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 1188 (2017).
2. Wei Hu, Lin Lin and Chao Yang, Projected Commutator DIIS Method for Accelerating Hybrid Functional Electronic Structure Calculations, *J. Chem. Theory Comput.* **13**, 5458 (2017).
3. Wei Hu, Lin Lin and Chao Yang, Interpolative separable density fitting decomposition for accelerating hybrid density functional calculations with applications to defects in silicon. *Journal of chemical theory and computation*, **13**, 5420 (2017).
4. Kun Dong, Wei Hu and Lin Lin, Interpolative separable density fitting through centroidal Voronoi tessellation with applications to hybrid functional electronic structure calculations, *J. Chem. Theory Comput.* **14**, 1311 (2018).
5. Qingcai Jiang, Lingyun Wan, Shizhe Jiao, Wei Hu, Junshi Chen and Hong An (2020, December). An Efficient Multi-GPU Implementation for Linear-Response Time-Dependent Density Functional Theory. In *2020 IEEE 22nd International Conference on High Performance Computing and Communications; IEEE 18th International Conference on Smart City; IEEE 6th International Conference on Data Science and Systems (HPCC/SmartCity/DSS)* (pp. 197-205). IEEE.
6. Lingyun Wan, Xiaofeng Liu, Jie Liu, Xinming Qin, Wei Hu and Jinlong Yang. Hybrid MPI and OpenMP parallel implementation of large-scale linear-response time-dependent density functional theory with plane-wave basis set. *Electron. Struct.* Accepted (2021).

7. Qingcai Jiang, Lingyun Wan, Xinming Qin, Wei Hu, Junshi Chen, Hong An, Jielan Li, Zijing Ding, Jie Liu, Mingfan Li, Mengxian Chi and Jinlong Yang. Pushing the Envelope of First-Principles Excited-State Simulations by Combining Low-Rank Approximation with K-Means Clustering. to be submitted.

五、开发者信息

- 开发人：胡伟、杨金龙、秦新明、李杰岚、万凌云、焦诗哲、张振林等
- 开发单位：中国科学技术大学
- 编程语言：C/C++、MPI、OpenMP、CUDA、HIP
- 开源类型：部分开源
- 版本：1.0
- 邮箱：jielanli@mail.ustc.edu.cn、whuustc@ustc.edu.cn



瀚海量子
Hanhai Quantum