
中科大首次实现千万核并行第一性原理计算模拟

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10299.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

中科大首次实现千万核并行第一性原理计算模拟。近日，中国科学技术大学（以下简称中国科大）针对大尺度数万原子分子固体体系的第一性原理计算模拟，以低标度平面波高精度计算软件DGDFT为基础，在国产神威·太湖之光超级计算机上实现了千万核超大规模并行计算，研究成果以High performance computing of DGDFT for tens of thousands of atoms using millions of cores on Sunway TaihuLight为题在线发表于Science Bulletin（《科学通报》英文版）。

这项成果由合肥微尺度物质科学国家研究中心、中国科大化学与材料科学学院教授杨金龙课题组，与计算机科学与技术学院教授安虹课题组联合攻关，在国家超级计算无锡中心和中国科学院软件研究所研究人员的紧密配合下完成。

DGDFT方法是利用自洽场(SCF)迭代过程中动态生成的自适应局域基函数(ALB)来求解KS方程，具有可媲美平面波基组的高精度计算结果。安虹告诉《中国科学报》，该项成果的算法实现采用了两级并行化策略，用于处理并行计算中各种类型的数据分布、任务调度和数据通信方案等；同时结合申威SW26010众核处理器特点，实现了主从核多线程异构并行和高性能计算函数库，在神威·太湖之光上完成了超大规模高性能DFT计算模拟。

计算结果表明，DGDFT方法可以在神威·太湖之光超级计算机上并行扩展到8519680个计算处理核(131072个核组)，能够用于研究含有数万碳原子(11520碳原子)的二维金属石墨烯体系的电子结构性质。

安虹表示，超级计算机和高性能计算技术的快速发展，使得基于KS方程密度泛函理论(KS-DFT)的第一性原理计算模拟在凝聚态物理、材料科学、化学和生物等研究领域变得越来越重要。

发展国产科学与工程计算软件时不我待。安虹对记者表示，自2010年以来，中国拥有了3台世界上计算速度最快的超级计算机，其中神威·太湖之光曾4次占据世界超级计算机TOP500排行榜第一，但国内第一性原理高性能计算软件却远远落后于超算硬件的发展。因此，随着国产超级计算机的快速发展，很有必要发展相应的理论算法和超大规模并行计算软件，从而充分发挥出这些超级计算机强大的计算能力，模拟研究更大尺度的物理化学问题。

谈及此次成果的创新性，安虹介绍说，此次通过超算应用团队、软件移植和性能优化团队、基础算法库开发团队以及国家超算中心硬件技术支持团队的紧密合作，实现了国内理论与计算化学的低标度理论算法与国产高性能并行计算软硬件优势的结合，充分发挥了神威·太湖之光超级计算机的强大计算能力。同时，开发了低标度、低通讯、低内存、低访存的并行计算方法，实现了具有平面波精度的千万核超大规模高性能并行计算，使模拟体系的大小(数万原子)比国际同等平面

波精度的计算模拟软件提高了数百倍。

这一成果说明，借助当代最先进的计算方法和世界顶级高性能计算平台，大体系、长时间的高精度第一性原理材料模拟已成为现实。安虹说。（来源：中国科学报 赵广立）

相关论文信息：10.1016/j.scib.2020.06.025

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：杨金龙等 来源：《科学通报》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发