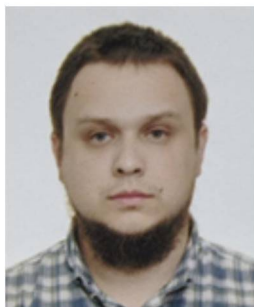


АНАЛИЗ И РЕФАКТОРИНГ БИБЛИОТЕКИ ОБМЕННО-КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ ПАКЕТА OPENMX



А.В. Баглов

*Старший научный сотрудник НИЛ энергоэффективных материалов и технологий физического факультета БГУ; научный сотрудник Центра 4.11 НИЧБГУИР
baglov@bsu.by*



Л.С. Хорошко

*Ведущий научный сотрудник НИЛ энергоэффективных материалов и технологий физического факультета БГУ; ведущий научный сотрудник Центра 4.11 НИЧБГУИР, канд. физ.-мат. наук, доцент
khoroshko@bsu.by*

А.В. Баглов

Окончил Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. Проводит научные исследования в области квантово-механического моделирования структурных и электронных свойств перспективных материалов.

Л.С. Хорошко

Окончила Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники. Область научных интересов связана с управляемым синтезом наноматериалов и их исследованием их свойств.

Аннотация. Проведен рефакторинг кода обменно-корреляционных функционалов пакета OpenMX, устранивший недочеты оригинала и оптимизировавший производительность. Созданная кроссплатформенная библиотека на ANSI C обеспечивает ускорение до 4 раз в среде Linux и сокращение объема исходного кода в 2,5 раза. Работа закладывает основу для дальнейшей интеграции современных функционалов, необходимых в теоретической физике твердого тела, наноматериаловедении и для развития материаловедческих ИИ-моделей с использованием пакета OpenMX. Открытый характер лицензии пакета OpenMX и

самодостаточность разработанной библиотеки способствуют ее интеграции в международное научное сообщество и использованию в образовательном процессе.

Ключевые слова: моделирование, *ab initio*, OpenMX, теория функционала плотности, программирование, ANSI, C.

Введение. Исследование свойств материалов путем численного моделирования является актуальным и востребованным научным направлением. В современной вычислительной физике твердого тела и наноматериаловедении для исследования структурных и электронных свойств объектов различной размерности наибольшее распространение получили так называемые *ab initio* (из первых принципов) методы, в основе которых лежат приближенные методы квантовой механики для решения многоэлектронной задачи [1].

Результаты, получаемые в процессе *ab initio* моделирования, позволяют значительно расширить, уточнить и дополнить данные, полученные экспериментальным путем [2].

Высокая достоверность предсказания кристаллической и электронной структуры различных соединений, оценка их стабильности и получение термодинамических характеристик делает эти методы незаменимым инструментом для компьютерного дизайна новых перспективных материалов для передовых областей науки и техники [3].

Центральное место среди *ab initio* подходов занимает теория функционала плотности (ТФП), сочетающая высокую точность и разумную вычислительную сложность, что позволяет исследовать системы различной размерности [4].

В рамках ТФП основное энергетическое состояние системы описывается через распределение электронной плотности в ней, а ключевым объектом выступает функционал, связывающий данное распределение с полной энергией системы [5].

В формализме Кона-Шэма данный функционал включает кинетическую энергию невзаимодействующих электронов, кулоновское взаимодействие, внешний потенциал и обменно-корреляционный член, включающий сложные квантовые эффекты межэлектронного взаимодействия. Ввиду отсутствия точного аналитического решения многоэлектронной задачи разработано множество обменно-корреляционных функционалов [6]. Проведение *ab initio* исследований реализуется с помощью специализированных научных пакетов, доступных как на коммерческой основе, так и бесплатно. Авторы данной работы в своих исследованиях активно задействуют пакет OpenMX (Open source package for Material eXplorer), бесплатно распространяемый под лицензией GPLv3, в котором ТФП сочетается с теорией псевдопотенциала [7–14].

Данный пакет был разработан в качестве высокоэффективного инструмента, оптимизирован для параллельной работы на большом числе вычислительных узлов, что позволяет проводить численное моделирование электронных и структурных свойств систем, содержащих сотни и тысячи атомов, в том числе металлоорганических каркасных структур, нанопроволок, нанотрубок, нанолент, наночастиц и биомолекул. Такая эффективность достигается, среди прочего, использованием в качестве базиса для описания электронных состояний численных псевдоатомных орбиталей, снижающих вычислительные затраты при сохранении высокой точности, необходимой для описания сложных комплексных наносистем.

Особенностью данного пакета является малое количество доступных обменно-корреляционных функционалов, которое обусловлено его научной специализацией. Поскольку архитектура пакета ориентирована на максимальную вычислительную эффективность при моделировании крупномасштабных систем с сохранением физической достоверности и численной точности, разработчики пакета сфокусировались на использовании наиболее широко применяемых обменно-корреляционных функционалов.

К настоящему моменту такой подход несколько устарел и ограничивает точность проводимых исследований при использовании данного пакета.

Целью данной работы является анализ и рефакторинг исходного кода пакета OpenMX, отвечающего за реализацию ТФП и разработка библиотеки, унифицирующей и расширяющей стандартный набор обменно-корреляционных функционалов.

Анализ текущих возможностей пакета. Согласно руководству пользователя в пакете OpenMX в настоящее время для использования доступны обменно-корреляционные функционалы, обозначаемые как LDA, LSDA-CA, LSDA-PW и GGA-PBE [15]. Большинство обозначений имеют составную структуру, где первая (левая) часть обозначает приближение, а вторая (правая) часть – аббревиатуру фамилий авторов, предложивших конкретную параметризацию (обменно-корреляционный функционал). LDA – Local Density Approximation – соответствует приближению локальной плотности (ПЛП), а LSDA – Local Spin Density Approximation – приближению локальной спиновой плотности (ПЛСП) соответственно. GGA – Generalized Gradient Approximation – соответствует обобщенному градиентному приближению, доступному в спин-неполяризованном и спин-поляризованном вариантах. Аббревиатуры CA, PW и PBE расшифровываются как Ceperley and Alder, Perdew and Wang, и Perdew and Burke and Ernzerhof соответственно [16–18]. Отметим, что в пакете OpenMX LDA эквивалентен спин-неполяризованному LSDA-CA. Также важно отметить, что в вариантах LDA/LSDA-CA, не глядя на аббревиатуру, используется репараметризация Perdew and Zunger [19].

За программную реализацию перечисленных обменно-корреляционных функционалов в пакете OpenMX отвечают следующие файлы: XC_CA_LSDA.c, XC_Ceperly_Alder.c, XC_EX.c, XC_PBE.c и XC_PW92C.c.

Анализ исходного кода показывает, что разработчики OpenMX адаптировали часть кода проекта SIESTA [20]. Поскольку пакет OpenMX написан на языке C, код, изначально созданный на Fortran, был перенесен с соответствующей адаптацией синтаксиса.

С нашей точки зрения представляется целесообразным выделение кода, связанного с обменно-корреляционными функционалами, во внутреннюю библиотеку, что позволит инкапсулировать доступные обменно-корреляционные функционалы от основного кода пакета и одновременно сохранит его архитектуру. Также инкапсуляция кода позволит существенно упростить дальнейшую разработку, сопровождение и поддержку подсистемы обменно-корреляционных функционалов.

Обсуждение требований к разработке. Для успешной реализации внутренней библиотеки обменно-корреляционных функционалов в пакете OpenMX необходимо рассмотреть ряд вопросов.

Поскольку пакет предназначен для научных исследований, то целевыми системами для его установки являются серверы суперкомпьютерных комплексов и вычислительные кластеры университетов и научных лабораторий. Анализ рейтинг суперкомпьютеров СНГ «Топ-50» показывает, что в составе суперкомпьютеров используются процессоры преимущественно 2014–2021 гг. [21]. Локальные кластеры научных лабораторий могут быть еще старше и неоднороднее. Таким образом следует обеспечить возможность сборки модифицированного пакета OpenMX на оборудовании более чем десятилетней давности.

С практической точки зрения необходимо обеспечить воспроизводимость результатов вычислений пакетом OpenMX до и после разработки библиотеки.

Независимость библиотеки обменно-корреляционных функционалов от основного кода также позволит оценить изменения в производительности непосредственно данного кода, поскольку оценка этих изменений путем анализа производительности самого пакета является нетривиальной задачей ввиду большого количества прочих вычислений.

Данный пакет также используется в рамках педагогической деятельности. Регулярно проводятся т.н. воркшопы для подготовки исследователей и студентов. Также известно о его использовании в составе лекций и практикумов по курсу «Введение в физику твердого тела» Орегонского университета [22], и спецкурсов на физическом факультете БГУ. Библиотека обменно-корреляционных функционалов также может быть использована

студентами теоретических специальностей в качестве автономного инструмента для численного моделирования таких фундаментальных объектов как однородный электронный газ и вигнеровские кристаллы, а также освоения приближенных методов теории многих частиц без необходимости развертывания полного программного комплекса OpenMX.

Поскольку сам пакет ожидаемо ориентирован на Unix-подобные операционные системы, следует обеспечить возможность компиляции библиотеки и в нативном окружении операционной системы Windows для использования в педагогической практике. Это позволит закрепить навыки программирования у студентов и улучшить понимания современных методов описания электронной структуры конденсированных сред.

Обсуждение результатов. Код обменно-корреляционных функционалов, как и сам пакет OpenMX, написан на языке программирования C.

В качестве стандарта авторы использовали ANSI, который также гарантированно поддерживается в компиляторе MSVC. Однако возможность компиляции кода в текущей версии в Windows ограничена использованием заголовочного файла `openmx_common.h`, содержащего ряд структур и макросов.

Для тестирования воспроизводимости и производительности на разных платформах мы модифицировали исходный код таким образом, чтобы исключить только привязку к указанному заголовочному файлу.

Непосредственно сам исходный код обменно-корреляционных функционалов написан в императивном стиле, что и следует из его сути. Каждый функционал реализован в отдельной функции, за исключением PBE, в котором обменная энергия вычисляется также через отдельную функцию, вызываемую в рамках выполнения основной.

В реализации разработчиков OpenMX мы обнаружили достаточно большое количество неиспользуемых переменных, что не влияет на функциональность, но затрудняет читаемость и анализ кода. По всей видимости это является следствием переноса с Fortran и незавершенной оптимизации производительности для компиляторов начала 2000-х годов, о чем говорит вынесение результатов части некоторых вычислений в локальные переменные и отсутствие ручной размотки циклов из двух итераций.

Поскольку ключевая идея ТФП – это связь между энергией и распределением электронной плотности, то во все функционалы входит фундаментальный параметр теории однородного электронного газа – радиус Вигнера-Зейтца. Данный параметр характеризует плотность системы через объем, приходящийся на один электрон.

Поскольку эти функции вызываются многократно (порядка 10^5 – 10^6 раз на каждую итерацию цикла самосогласования), в процессе рефакторинга следует уделить внимание их оптимизации. Исходно авторы для нахождения радиуса Вигнера-Зейтца использовали функцию `pow`, возводящую основание в степень $1/3$.

В операционной среде Linux оптимизатор компиляторов GCC, Clang и ICC с уровня -O2 обеспечивал замену функции на более быструю функцию взятия кубического корня `sqrt` и ее встраивание, в то время как MSVC ограничивался только встраиванием функции. Части кода, использующие ветвления, были перестроены таким образом, чтобы первой стояла ветвь, которая будет наиболее вероятно исполняться. Учитывая, что глубина вложенности не превышает трех уровней, такой код не является проблемой для предсказателя ветвлений современных процессоров. Тем не менее, такой подход делает код более компактным, что упрощает его поддержку.

Также мы по возможности осуществили замену процедур деления на умножение, где это было разумно. Проанализировав код, мы завершили начатый разработчиками пакета вынос некоторых частей вычислений в отдельные переменные, которые с большей вероятностью остаются в процессорном кэше и способствуют ускорению вычислений.

В оригинальном коде используется отсечка малых значений электронной плотности, что является стандартной практикой, т.к. ее околонулевое значение часто приводит к

численным неустойчивостям. Исходно это значение различалось для различных функционалов.

Мы выбрали единое значение 10^{-14} для всех случаев, как это принято в большинстве случаев. Заметим, что из-за исходной рассогласованности в функционале LSDA-PW92 была допущена ошибка при обработке плотности ниже порога отсечки. Это могло несколько исказить получаемые значения энергии для систем с большими участками вакуума. В случае спин-поляризованных систем разработчики пакета по-разному проводили их обработку. Помимо опечаток было обнаружено, что выбор LSDA-PW92 и GGA-PBE мог привести к аварийному завершению работы пакета при неудачном выборе спиновой конфигурации при инициализации расчета.

Вероятность такого события мы оцениваем как крайне малую, поскольку это потребовало бы использования нефизических входных данных. Однако, соответствующие исправления внесены.

В результате выполненной работы файл `xclib.c` содержит исправленную и оптимизированную библиотеку обменно-корреляционных функционалов, ранее содержавшихся в пяти отдельных файлах. В результате рефакторинга объем исходного кода уменьшился примерно в 2,5 раза. В свою очередь, это привело к уменьшению объектного файла в 1,8 раза, что свидетельствует о большей компактности кода в машинном представлении. Проверена работоспособность пакета OpenMX с новой версией внутренней библиотеки обменно-корреляционных функционалов.

Для тестирования была написан вращатель для библиотеки, и подготовлены наборы тестов для всех функционалов. Анализ показал, что наблюдается небольшое расхождение в тестовых наборах данных, поскольку исходные численные константы были заменены на более точные, а также была изменена последовательность и тип операций. Усредненное отклонение составило менее 10^{-6} по всему тестовому набору.

При анализе производительности было обнаружено, что в операционной системе Linux с использованием компилятора GCC с уровнем оптимизации `-O2` новая библиотека в 2–4 раза быстрее исходной, в то время как в операционной системе Windows с использованием компилятора MSVC с таким же уровнем оптимизации новая библиотека медленнее оригинальной в среднем на 30%.

Анализ показал, что реализация функции `cbvt` в библиотеке LibM значительно быстрее функции `row`, использованной в оригинале, в то время как в библиотеке MSVCRT ситуация обратная – `cbvt` значительно медленнее `row`, что подтверждено отдельными тестами. Детальное тестирование воспроизводимости и анализ производительности будет представлен в отдельной публикации.

Заключение. Проанализирован исходный код пакета OpenMX, отвечающий за обменно-корреляционные функционалы. Установлено, что данный код получен портированием с языка Fortran проекта Siesta. Обнаружено, что в процессе переноса были созданы неиспользуемые переменные, допущены ошибки в обработке сильно спин-поляризованных систем, а также при обработке низких значений распределения электронной плотности, а низкоуровневая оптимизация проведена не полностью.

В результате проведения рефакторинга и оптимизации исходного кода предложена новая внутренняя библиотека обменно-корреляционных функционалов, в текущий момент полностью сохраняющая функциональность оригинала, но содержащая необходимые исправления.

Библиотека является кроссплатформенной и может быть скомпилирована на любой платформе, поддерживающей ANSI C.

Рефакторинг позволил сократить размер исходного кода в примерно 2,5 раза, а объем объектных данных уменьшить примерно в 1,8 раза при повышении читаемости и упрощении сопровождения.

Оптимизация позволила добиться ускорения от двух до четырех раз в операционной системе Linux, в то время как использование компилятора MSVC в операционной системе Windows приводит к замедлению примерно на 30%, что обусловлено особенностями реализации функции взятия кубического корня `cbt` в стандартных математических библиотеках.

Разработанная библиотека послужит фундаментом для интеграции современных обменно-корреляционных функционалов (PBEsol, RPBE, AM05 и др.), востребованных в теоретической физике твердого тела и наноматериаловедении.

Расширенная версия библиотеки будет особенно полезна для подготовки набора референтных данных, пригодных для обучения больших языковых моделей, применяемых в прикладном материаловедении, например, для генерации высокоточных датасетов электронных структур.

Уникальность данной работы для Республики Беларусь заключается в создании высокотехнологичного программного решения в области квантово-механического моделирования, не имеющего отечественных аналогов.

При этом открытый характер лицензии GPLv3 обеспечивает интеграцию библиотеки в международное научное сообщество, подтверждая высокий уровень и конкурентоспособность белорусской научной школы.

При этом самодостаточность библиотеки позволяет использовать её в текущем виде в учебном процессе для студентов теоретических специальностей, исключая необходимость полного развертывания пакета OpenMX.

Благодарности. Работа частично поддержана БРФФИ (проект № T25MЭ-007), а также в рамках задания № 1.2.2 «Тонкопленочные и двумерные полупроводниковые материалы на основе углерода, халькогенидов, в том числе тугоплавких металлов, и неорганических перовскитов для приложений сенсорики, фотовольтаики, нано- и оптоэлектроники» подпрограммы «Физика конденсированного состояния, разработка технологий создания функциональных инструментальных материалов и устройств», НИР «Низкотемпературный синтез и свойства наноструктурированных композитов на основе перовскитных соединений с кластерами редкоземельных элементов и углерода для конвертеров оптического излучения и фотовольтаики» подпрограммы «Наноструктуры, наноматериалы и технологии» ГПНИ «Современное материаловедение, перспективные материалы и новые технологии»; НИР «Разработка научных основ и методов сенсификации, детектирования и фотокаталитической деструкции органических загрязнителей, включая микро- и нанопластики, в водных средах с применением гибридных мультифункциональных нанокompозитов на основе оксидных полупроводников» подпрограммы «Междисциплинарные исследования и перспективные технологии» ГПНИ «Конвергенция 2030».

Список литературы

- [1] Hohenberg, P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // *Physical Review*. – 1964. – Vol. 136. – PP. B864–B871.
- [2] Kawazoe, Y. How well can physical, chemical, and mechanical properties of materials be predicted by ab initio techniques? / Y. Kawazoe // *Materials & Design*. – 2001. – Vol. 22, № 1. – PP. 61–67.
- [3] Shevlin, S. Computational materials design / S. Shevlin, A. H. Castro Neto // *Nature Materials*. – 2021. – Vol. 20. – PP. 727–728.
- [4] Kohn, W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals / W. Kohn // *Reviews of Modern Physics*. – 1999. – Vol. 71, № 5. – PP. 1253–1266.
- [5] Kohn, W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Physical Review*. – 1965. – Vol. 140, № 4A. – PP. A1133–A1138.
- [6] Perdew, J. P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – Vol. 77, № 18. – PP. 3865–3868.
- [7] Ozaki, T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67, № 15. – P. 155108.

- [8] Ozaki, T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69, № 19. – P. 195113.
- [9] Ozaki, T. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // *Physical Review B*. – 2005. – Vol. 72, № 4. – P. 045121.
- [10] Baglov, A. V. Atom Species Energy Dependence on Magnetic Configurations in the Perovskite Yttrium Orthoferrite / A. V. Baglov, L. S. Khoroshko // *Doklady BGUIR*. – 2021. – Vol. 19, № 8. – P. 63–67.
- [11] Baglov, A. V. Crystal Structure and Electronic Properties of Rhenium Disulfide / A. V. Baglov, L. S. Khoroshko // *Journal of Applied Spectroscopy*. – 2022. – Vol. 89. – P. 860–864.
- [12] Baglov, A. Evolution of Structural and Electronic Properties Standardized Description in Rhenium Disulfide at the Bulk-Monolayer Transition / A. Baglov, L. Khoroshko, A. Zhoidzik [et al.] // *Heliyon*. – 2024. – Vol. 10. – P. e28646.
- [13] Baglov, A. V. Electronic Structure of Bismuth Ferromanganite $\text{BiFe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_3$ / A. V. Baglov, L. S. Khoroshko, M. V. Silibin, D. V. Karpinsky // *Semiconductors*. – 2024. – Vol. 58, № 13. – P. 1054–1059.
- [14] Baglov, A. V. Structural and Electronic Properties of $\text{SmGaGe}_2\text{O}_7$ Studied by First Principles Methods / A. V. Baglov, L. S. Khoroshko // *Inorganic Materials*. – 2023. – Vol. 59, № 1. – P. 1–7.
- [15] Ozaki, T. Functional // User's manual of OpenMX Ver. 3.9 / T. Ozaki, H. Kino, J. Yu [et al.]. – 2018. – URL: https://openmx-square.org/openmx_man3.9/node23.html (дата обращения: 27.03.2026).
- [16] Ceperley, D. M. Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method / D. M. Ceperley, B. J. Alder // *Physical Review Letters*. – 1980. – Vol. 45, № 7. – P. 566.
- [17] Perdew, J. P. Accurate and Simple Analytic Representation of the Electron-Gas Correlation Energy / J. P. Perdew, Y. Wang // *Physical Review B*. – 1992. – Vol. 45. – P. 13244.
- [18] Perdew, J. P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – Vol. 77, № 18. – P. 3865.
- [19] Perdew, J. P. Self-Interaction Correction to Density-Functional Approximations for Many-Electron Systems / J. P. Perdew, A. Zunger // *Physical Review B*. – 1981. – Vol. 23, № 10. – P. 5048.
- [20] García, A. Siesta: Recent developments and applications / A. García, N. Papior, A. Akhtar [et al.] // *Journal of Chemical Physics*. – 2020. – Vol. 152, № 20. – P. 204108.
- [21] Рейтинг 50 наиболее мощных суперкомпьютеров России // TOP50. – URL: <https://top50.supercomputers.ru/list> (дата обращения: 27.03.2026).
- [22] Tate, J. PH 575 Introduction to Solid State Physics / J. Tate // Oregon State University. – 2019. – URL: <http://physics.oregonstate.edu/~tatej/COURSES/ph575> (дата обращения: 27.03.2026).

Авторский вклад

Баглов Алексей Викторович – постановка задачи исследования, анализ, написание, тестирование и сопровождение кода, написание статьи.

Хорошко Людмила Сергеевна – постановка задачи исследования, обсуждение, написание статьи.

ANALYSIS AND REFACTORING OF THE LIBRARY OF EXCHANGE-CORRELATION FUNCTIONS OF THE OPENMX PACKAGE

A.V. Baglov

Senior researcher in the R&D Lab of Energy-effective materials and technologies, Faculty of Physics, BSU; Researcher in the Center 4.11 of R&D Department, BSUIR

L.S. Khoroshko

Lead researcher in the R&D Lab of Energy-effective materials and technologies, Faculty of Physics, BSU; Lead Researcher in the Center 4.11 of R&D Department, BSUIR

Abstract. The exchange-correlation functionality of the OpenMX package was refactored to eliminate the original's shortcomings and optimize performance. The resulting cross-platform library, written in ANSI C, delivers a 4x speed boost on Linux systems and reduces source code size by 2.5x. This work paves the way for the integration of additional modern functionality required for theoretical solid-state physics, nanomaterials science, and the development of materials science AI models using the OpenMX package. The open license of OpenMX and the self-sufficiency of the developed library facilitate its integration into the international scientific community and its use in education.

Keywords: modeling, ab initio, OpenMX, density functional theory, programming, ANSI, C.