

经典案例

采用HPC先进计算方法优化国产量子材料计算软件PWmat

项目背景

- ◆ 新材料的发现与应用已成为支撑工业高质量发展的关键。近年来，高性能计算与人工智能的突飞猛进，极大地扩展了计算材料学的预测效率和能力。从材料结构搜索到器件仿真，材料模拟正在加速并优化材料研发流程，在推动智能制造革新方面发挥着越来越重要的作用
- ◆ 北京龙讯旷腾科技有限公司是成立于2015年的国家高新技术企业，是国内材料计算模拟工具软件研发创新的领导者，公司自主开发的量子材料计算软件PWmat（平面波赝势方法并基于GPU加速）可以进行电子结构计算和从头算分子动力学模拟，适用于晶体、缺陷体系、半导体体系、金属体系、纳米体系、量子点、团簇和分子体系等

客户需求

龙讯旷腾自主研发的国产第一性原理计算软件PWmat，综合最优算法、高性能计算、人工智能等先进技术手段，在计算规模、计算效率以及多场景应用等方面具备国际领先的技术优势。但PWmat在使用时存在这些痛点：

- ◆ 软件多个功能模块没有统一的登陆入口，不利于用户使用
- ◆ 用户需要先熟悉Linux基础才能使用Mcloud进行材料模拟，学习成本比较高
- ◆ 用户申请也不方便，用户无法自己注册平台
- ◆ 计费统计不方便，包括CPU核时、GPU核时以及存储等资源计费，直接用Slurm命令行统计不直观，无法给客户作业计费详情
- ◆ 资源统一调度和管理比较麻烦，没有统一的管理界面

经典案例

采用HPC先进计算方法优化国产量子材料计算软件PWmat

■ 项目内容

将PWmat部署在高性能计算管理平台CHESS，使用CHESS多级用户管理、图形化提交页面、集群运行状态监控、计费（包含充值和打折等）等功能模块，用户可以通过 web 浏览器注册、登录、使用，并在平台上直观清晰地选择计算资源并按需付费，享受高性能计算带来的极致体验。

■ 项目亮点

该项目针对PWmat软件应用难题定制开发，依托CHESS稳定高效的资源管理功能，将集群资源按需调度与行业应用有效融合，共同建设一套统一管理、高效运维的材料计算服务平台。

■ 客户收益

- ◆ CHESS集群管理平台具有高可用性，用户使用方便，可以自主注册平台，用户量迅速增加
- ◆ 让用户实现更多提交作业的方式，无需具备Linux 系统使用经验，直接点鼠标、上传文件即可完成材料模拟计算，极大降低了学习成本
- ◆ 有了统一的资源管理界面，充值方便、计费直观，方便资源管理，极大得节约了运维成本，降低计算耗时
- ◆ 通过CHESS平台，打通了各个公司各个功能模块的用户管理，方便用户按需使用不同功能模块
- ◆ 将高性能计算强大算力资源与先进计算方法服务于工业材料设计研发，加快材料研发速度、降低研发成本、提高材料设计的效率