

·“双清论坛”专题:理论化学家视角中的仪器创制·

优化资源研发具有影响力的电子结构计算软件包

吴 玮* 苏培峰

(厦门大学化学化工学院, 厦门 361005)

[摘要] 理论化学的重要地位和与日俱增,然而作为理论化学的主要研究手段,国内理论化学计算软件发展的现状却不容乐观。本文就当前理论化学国内软件开发工作面临的挑战和机遇,提出若干需要重视的问题。

[关键词] 电子结构理论;化学键;从头计算;计算软件

长期以来,化学一直被人们认为是一门实验科学,然而随着科学技术的发展,实验、理论和计算逐渐成为当代化学研究不可或缺的三大手段。作为化学的一个分支学科,理论与计算化学已经渗透到化学学科的各个方向,与其他实验学科紧密联系、相互促进和协同发展。电子结构理论计算软件是理论与计算化学的主要研究工具。基于计算机科学技术的高速发展以及电子结构理论计算方法的日益成熟,国际上电子结构理论计算软件非常丰富,不仅有如 Gaussian, VASP 等大型商业软件,也有各课题组独自开发的具有特殊计算功能的软件。近年来,我国理论化学家在电子结构理论计算方法的发展和程序化工作取得许多进展,不少工作富有特色在国际同行中具有一定的影响力。然而,从整个国家层面来看,由于从事软件开发的课题组分散,人力和财力资源有限,导致所开发的软件没有得到最好的优化,用户体验不好,国际影响力不够。鉴于当前国内理论化学学科发展的现状与面临的挑战和机遇,国内软件开发工作需要重视下面几个问题。

1 找准特色确定优先发展方向

当前国内自主开发的可用于通用计算的电子结构理论计算软件极少,化学家涉及的计算工作(几何构型优化、频率分析、光谱拟合等),几乎都是使用国外软件完成的。国际电子结构计算程序的计算效率、计算精度和用户体验都已经达到了相对高的水

平,其垄断性地位在较长的一段时间内无法改变。发展我国理论化学软件必须有所为有所不为。

我国理论化学软件在密度泛函理论、从头算价键理论,相对论量子化学理论,和高精度多参考电子相关计算方面,有一定的优势。近年出现了一批有较大影响的国内自主知识产权的计算软件。但这些程序的进一步发展也遇到了瓶颈。以厦门价键(XMVB)为例,作为国内自主知识产权的独立软件,厦门价键(XMVB)是一个基于非正交轨道的从头算价键理论通用计算软件,具有计算速度快,计算方法多,用户体验好等特点,至今已提供给 30 多个国家的近 150 个课题组或个人使用,是当前国际上使用人数最多,最具影响的从头计算价键理论方法软件。然而由于缺乏稳定的人员和经费支持,目前的软件仍然存在不少问题有待解决,特别是在代码优化、用户体验等方面。

建议国家对一些已经有一定基础且在国际上具有较重要影响的自主计算软件给予优先支持,帮助这些软件提升国际竞争力和影响力。

2 优化整合建立软件开发共享平台

我国现有从事软件开发的课题组所擅长的领域分散,在各种考核压力下,从事软件开发的科研人员只能各自为战,无法形成合力。从而导致学术影响力一直受限,软件用户人数也相对稀少。由于信息沟通不畅,存在重复开发,低效率重复等问题。

收稿日期:2017-10-10;修回日期:2017-12-13

* 通信作者,Email: weiwu@xmu.edu.cn

建议国家自然科学基金委牵头整合,建立软件开发通用平台,使各个课题组可以通过平台分享资源,包括人力资源和现有软件资源,整合普适通用的模块,比如基组积分计算、高效自洽场迭代和几何构型优化引擎等,形成公共开发软件平台,提供各个课题组使用,让各个课题组可以在这个平台上发展自己的方法模块,最终形成具有国际影响力的中国自主知识产权电子结构计算软件。

3 加大资助的力度和周期,优化研发环境

程序研发通常需要相对长的周期,以 Gaussian 为例,该程序从上个世纪七十年代发展的 Gaussian70 版本算起,发展到现在已经有近五十年的历史。其他有较大影响力的程序,也无一不是通过长期逐步累积发展起来的。单靠国家自然科学基金 3—5 年的资助周期,很难有效的支持程序研发。建议相对长周期地资助软件开发,并且针对工作的特

殊性,在基金的申请和结题审核中采取和一般项目不同的考核标准,以鼓励程序研发人员的学术积极性。

电子结构计算软件的竞争本质上是人的竞争。如果没有新的理论、新的方法、新的算法源源不断的加入,在优胜劣汰的环境下,用户不断流失,软件的生命自然终止。现有国际电子结构计算软件无不是有大规模的课题组的支持。发展方法,编写程序对科研人员的理论基础提出了更高的要求。在现有学术环境下,我国从事理论与计算化学的研究人员绝大部分以应用计算为主。由于研究周期长,不容易出文章,从事算法和程序开发的科研人员压力大,人才队伍不断流失。更值得注意的是,愿意进入这方面研究的学生越来越少。建议国家自然科学基金委对从事方法与程序研发的研究人员设立“特区”,重点扶持。优化研发环境,以支持人才队伍的可持续发展。

Towards Chinese high impact quantum chemistry packages

Wu Wei Su Peifeng

(College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005)

Abstract Theoretical chemistry is playing a more and more important role. However, as the primary research tool for theoretical chemistry, the status of the development of computational chemistry softwares in China is not optimistic. In this paper, several issues, which concern the challenges and opportunities for the development of domestic computational chemistry softwares, have been addressed.

Key words electronic structure theory; chemical bonding theory; ab initio calculations; computational chemistry softwares