

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人： 高兴誉 副研究员

( 北京应用物理与计算数学研究所 中物院高性能数值模拟软件中心 )

报告题目：

原子弛豫中的局域优化算法

邀请人： 刘歆 副研究员

报告时间： 2019 年 2 月 18 日 (周一)

下午 15:30-16:30

报告地点： 科技综合楼三层

311 报告厅

## 摘要:

原子弛豫通过调整原子位置极小化能量泛函，是结构建模过程中最耗时的规定动作。我们首先介绍 **Kohn-Sham** 密度泛函理论的能量泛函，然后介绍一种基于共轭梯度方法的原子弛豫局域优化算法，最后讨论初步测试的结果与算法改进的空间。

# 欢迎大家参加！