基于有限体积离散的第一原理电子结构计算

杨章
导师：周爱辉 研究员

2011 年 5 月 20 日

摘要

本文围绕密度泛函理论第一原理电子结构计算实空间方法进行了研究, 包括算法设计与分析、程序设计和计算模拟. 在算法方面, 我们设计并分析了一类二阶椭圆特征值问题的对称有限体积方法以及有限体积/有限元两水平高阶耦合离散格式, 并将它们应用到电子结构计算中. 理论分析和数值实验均表明我们的两水平耦合格式具有与二次元相同的收敛阶. 在程序方面, 我们基于面向对象设计方法, 设计并实现了实空间电子结构计算程序 “CRESC”. CRESC 支持有限元和有限体积等多种离散方法. 在计算模拟方面, 我们用 CRESC 在并行计算机上有效地计算了上千个原子的体系的基态总能和电子结构, 并成功在天河一号超级计算机将我们的程序扩展到超过 6000 个 CPU 核.

关键字： 第一原理计算, 电子结构, 密度泛函理论, Kohn-Sham 方程, 有限体积方法, 两水平格式, 自适应计算, 面向对象设计