第一原理计算的若干实空间算法研究

方俊

摘要

本文围绕第一原理计算的实空间方法进行算法设计及实现技术研究。

算法方面包括 Kohn—Sham 方程的有限元算法和具对称性特征值问题的分解方法。前者由三个基本算法构成：局部加密网格生成算法在求解之前生成一个具合适多分辨率的网格；带校正的集中质量方案在保持自洽收敛和能量精度的同时加速广义特征值问题的求解；后处理方法通过简单的重构技术改善特征值和总能计算精度。分解方法则面向一般的实空间网格离散，利用问题特性提高计算效率。具空间对称性的微分特征值问题被分解为一组特征值子问题。该分解方法适用于大规模实空间网格离散，可以大幅节省计算时间，且问题规模越大优势越明显。

基于上述算法，我们自主开发第一原理计算的并行程序，采用六面体有限元求解 Kohn—Sham 方程并计算一些基态性质。目前，我们成功实现了包含数千原子的对称体系的基态总能计算，以及包含数十原子的分子体系的结构弛豫模拟。

关键词：第一原理计算，电子结构，Kohn—Sham 方程，对称性，实空间网格离散，六面体有限元方法