基于平均场模型与强关联理论的第一原理计算

朱金伟

摘要

本文主要围绕第一原理计算的实空间方法进行研究, 包括算法设计与分析、程序开发及计算.

算法设计包含两部分, 用于基于密度泛函理论的Kohn-Sham方程求解及基于强关联计算理论的经典/量子格点模型求解. 针对Kohn-Sham方程求解, 我们首先设计了基于单电子轨道更新的并行轨道更新算法. 通过构造简单的迭代方法并选择合适的初始解, 可得到高精度的解; 其次, 我们考虑与Kohn-Sham方程等效的能量极小化问题并设计了一类基于retraction操作的梯度型优化算法. 基于Stiefel流形上的非线性搜索, 避免大规模特征值计算, 从而可高效进行大规模体系计算. 针对经典/量子格点模型, 我们设计了两种基于张量高阶奇异值分解的张量重整化群方法: HOTRG及HOSRG方法. 数值实验表明HOTRG即可获得高精度数值解, 而HOSRG方法可进一步提升精度.

基于上述提出的针对密度泛函理论的第一原理电子结构计算方法, 我们发展了实空间第一原理计算平台RealSPACES. 基于发展后的RealSPACES平台, 实现了自适应有限元离散方法下的一类全电子计算、分子体系结构优化及初步的第一原理分子动力学计算.