第一原理电子结构计算的优化算法若干研究

刘壮

摘 要

本文主要围绕基于密度泛函理论的第一原理电子结构计算展开工作, 包括算法设计与分析以及数值模拟. 在算法设计方面, 我们从 Kohn-Sham 能量极小化问题出发, 设计了保正交约束的共轭梯度法与并行轨道优化算法. 在保正交共轭梯度法中, 我们提出了一个基于 Hesse 算子信息的步长策略, 使用了三种保正交约束的策略 (WY、QR 和 PD 策略) 来保持轨道的正交性. 与梯度型优化方法相比, 我们的共轭梯度法具有精度高、迭代次数少和稳定性强等优点. 在并行轨道优化算法中, 我们将 Kohn-Sham 能量极小化问题分解为一组相互独立的子优化问题. 我们并行求解这些子优化问题再用显式正交化的方法来保持正交约束, 通过使用自由度与轨道的两层并行来达到更高的并行可扩展能力. 在算法分析方面, 在一些合理的假设下, 我们证明了基于 WY 与 PD 正交化策略的共轭梯度法的局部收敛性. 在数值模拟方面, 基于第一原理实空间计算软件平台 Octopus, 我们将保正交约束的共轭梯度法应用于一些典型分子与大的碳团簇体系的求解, 数值结果表明我们的算法是稳定且高效的. 对于并行轨道优化算法, 我们测试了算法的可靠性与轨道可并行度, 发现我们的算法在保证计算精度的同时具有很好的应用于大规模体系并行计算的潜力.

关键词 第一原理计算, 密度泛函理论, Kohn-Sham 方程, 总能极小, 保正交约束, 共轭梯度法, 轨道并行, 大规模并行