第一原理电子结构计算倒空间算法研究

潘 妍

摘要

本文工作围绕基于密度泛函理论的第一原理电子结构计算倒空间算法研究展开，主要包括算法设计与分析、程序实现与应用。

首先，针对第一原理电子结构计算的核心数学模型——Kohn-Sham 方程的求解，我们提出了基于并行轨道更新的平面波方法。进一步，我们还提出了两个修正的并行轨道更新方法。与传统平面波方法相比，我们算法两层并行的特点，使得其在大规模并行计算中更有竞争力。数值实验表明，我们的新方法在对大规模体系进行大规模并行计算时更有优势。

其次，针对带正交约束的 Kohn-Sham 能量泛函极小化问题的求解，我们提出了一类预条件共轭梯度法。预条件子的加入减少了迭代的次数，加速了收敛，降低了计算量。进一步，我们将组内已有的优化算法和新提出的预条件共轭梯度法在著名的第一原理计算开源软件 Quantum ESPRESSO 中成功实现。

最后，针对一类线性特征值问题，我们设计了相应的平面波自适应算法，并对算法的收敛性和复杂度进行分析。我们证明了一类二阶线性椭圆特征值问题平面波自适应方法具有线性收敛率和最优复杂度。特别地，我们的分析结果对单特征值问题和重特征值问题都适用。

关键词： 第一原理计算，平面波方法，并行轨道更新算法，并行计算，预条件共轭梯度法