

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人： 高兴誉 研究员

(北京应用物理与计算数学研究所)

报告题目：

密度泛函非线性特征值问题的
自洽迭代加速算法研究

邀请人： 戴小英 研究员

报告时间： 2021 年 9 月 18 日 (周六)

上午 10:30-11:30

报告地点： 数学院南楼

702 教室

摘要:

本报告介绍Kohn-Sham密度泛函非线性特征值问题的自洽迭代的加速算法。一方面，我们对静态计算构建了统一的预处理矩阵，发展了第一个自适应预处理方案。另一方面，我们对分子动力学计算证明了电子波函数最优外推阶的存在，并对平衡态模拟给出了确最优外推阶的实用方案。特别指出，把握长程介电行为是加速密度泛函非线性特征值问题自洽收敛的关键。

欢迎大家参加！