

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 副研究员

(北京应用物理与计算数学研究所)

报告题目：

大规模第一性原理分子动力学
模拟的数值算法

邀请人： 黄记祖 博士

报告时间： 2016 年 3 月 24 日 (周四)

上午 10:30~11:30

报告地点： 科技综合楼三层

301 小报告厅

摘要:

基于 Born-Oppenheimer 近似的第一性原理分子动力学（以下简称 BOMD）模拟是评估材料性能的重要理论手段。由于 BOMD 的每个时间步需要求解 Kohn-Sham 方程，实现千原子皮秒级 BOMD 模拟比较困难。针对这一难题，我们发展了三项关键技术：1）提出一种新的网格划分算法权衡平面波负载平衡与 FFT 通信延迟，提高平面波的并行可扩展性；2）集成和发展波函数外推技术，为每个时间步提供更好的自治初值、减少平均自治迭代次数；3）自适应选择时间步长，减少所需时间步。我们将上述三项关键技术集成于第一性原理软件包 CESSP，有效支撑了 800 个锆原子（9600 个价电子）1 皮秒的 BOMD 模拟，在“天河二号”计算机上比商业软件 VASP 快 30 倍。这种能力支撑我们在两个月内完成了 80 多组大规模 BOMD 模拟，精确预测了反应堆包壳材料锆的辐照损伤重要参数离位阈能（Threshold Displacement Energy, TDE），与实验室的相对误差为 2%，是我们目前所知的最接近实验值的理论计算结果。

此外，我们将在本报告详细介绍其中的一种关键技术：平面波负载平衡约束下的并行三维 FFT。

以上工作是与方俊、王涵、林德烨共同完成的。

欢迎大家参加！