

VASP 的并行、迭代算法和赝势

姜 骏

北京市计算中心

E-mail: jiangjun@bcc.ac.cn

2023.04.21

VASP 的并
行、迭代算法
和赝势

Jun__Jiang

VASP 软件

VASP 中的
电荷密度混合
与矩阵迭代对
角化

VASP 计算的
原子数据重建

小结

1 VASP 软件

2 VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

3 VASP 计算的原子数据重建

4 小结

VASP 软件简介



VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

VASP 软件是维也纳大学 (Universität Wien) G. Kresse 等开发的第一原理模拟软件包

- VASP 采用 PAW (Projector Augmented-Wave) 方法^[1, 2], 平衡了赝势方法和全电子计算优点, 兼顾了计算的精度和效率
- VASP 在实空间优化投影函数 (Projector), 将主要的计算过程变换到实空间完成, 大大节省了内存的开销
- VASP 通过引入多样的优化算法, 提高了矩阵对角化和电荷密度搜索的效率^[3, 4]
- 在 VASP 的并行计算中, 有效均衡了各节点处理 FFT 变换负载和通信, 提升了软件的并行效率

相比于其他第一原理计算软件, VASP 从物理思想与方法、优化算法和并行计算实现等多个方面都有更为出色的性能^[5, 6]

VASP 的开发团队



VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

The VASP team



o. Univ. Prof. Dr. Georg Kresse



Dr. Doris Vogtenhuber



Dr. Martijn Marsman



Dr. Merzuk Kaltak



Dr. Ferenc Karsai



Dr. Martin Schlupf

Fig.: The development team of VASP.

Jun_Jiang

VASP 的并行、迭代算法和赝势

VASP 的 Kohn-Sham 方程求解流程

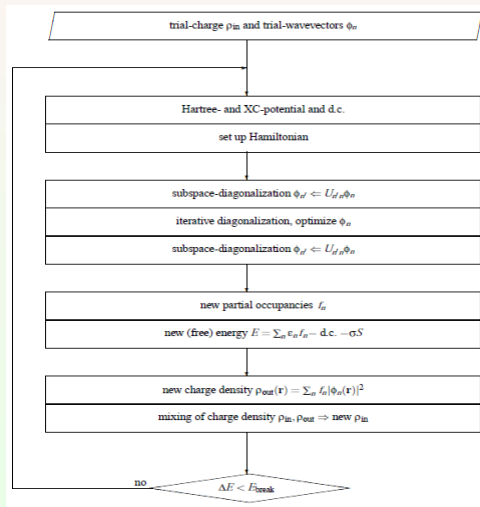


Fig.: The Flow of calculation for the KS-ground states.

双网格技术

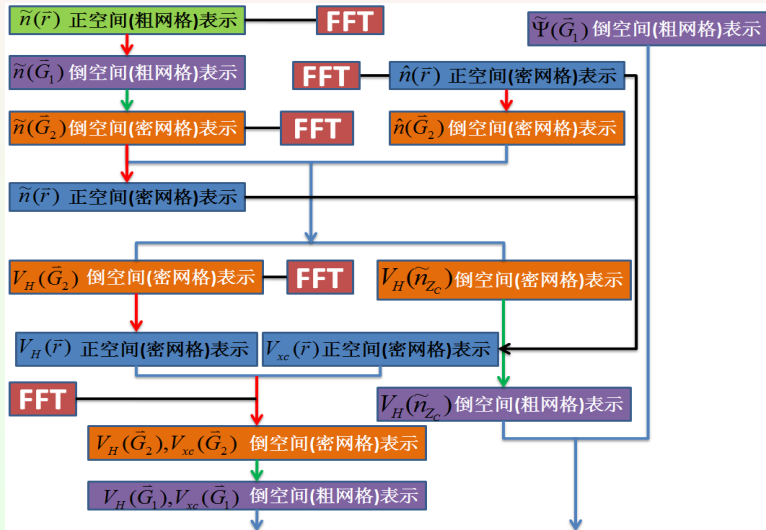


Fig.: The Schematic description of the dual grid technique.

VASP 的并行效率

与同类型软件相比，VASP 有着优异的并行能力

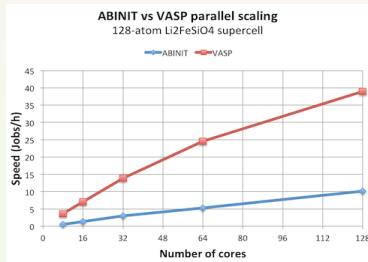
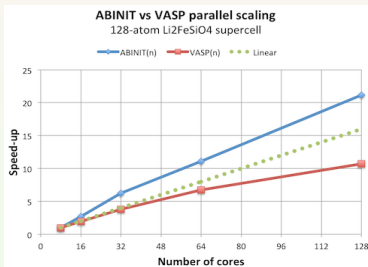


Fig.: The comparison of parallel scaling for ABINIT vs VASP.

- VASP 迭代对角化约束了矩阵的维度，减少了对角化过程中的迭代次数，保证了 MPI 并行的规模和扩展性
- VASP 实施 FFT 变换时，保证各节点上处理的网格负载均衡

VASP 计算的 FFT 并行实现

- 中间层设计: FFT 网格、实空间基组与计算节点的匹配
通过子程序 `mgrid.F` 生成中间层, 实现并行负载与计算节点分配的匹配, 减少 FFT 变换和实空间并行的节点间通信

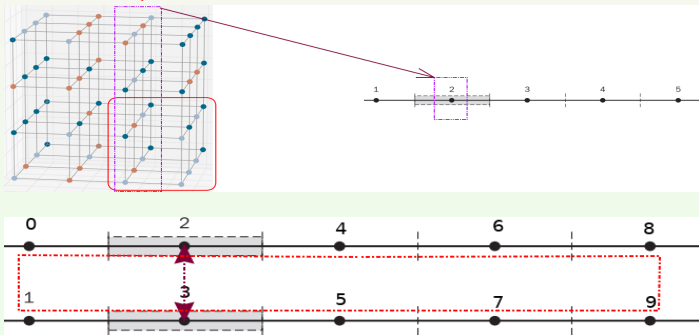


Fig.: VASP: Reciprocal-Real space layout for grids in MPI.

VASP 的通信开销

在高性能的计算队列中，VASP 的并行上限可以突破 256 核，但当并行核数超过百核数量级，并行效率下降非常明显

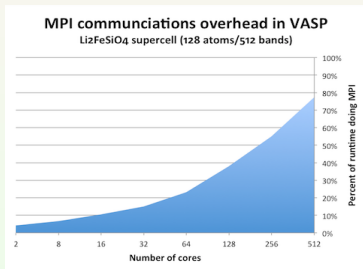


Fig.1 Time spent in MPI calls with increasing the number of ranks in a VASP calculation.

如能对并行系统与 VASP 结合作深度改造 (如国家超算天津中心方案), VASP 的并行扩展可以到 10^4 核级别, 但这一改造需要对底层代码和计算框架作较大规模改动

VASP 的 GPU 加速



VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

NVIDIA 多年来致力于 VASP 的 GPU 加速，取得了一定的成效

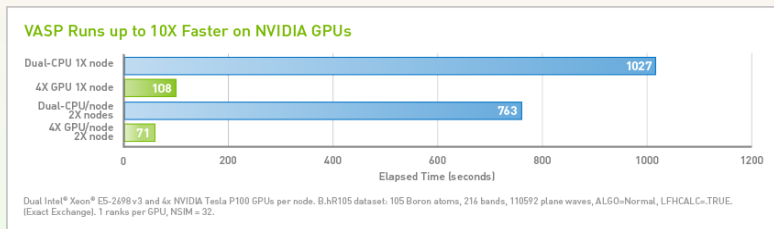


Fig.: Compare of VASP calculation with GPU and CPU.

- 通用配置下，GPU 对 VASP 计算有加速效果，一般可提升 4~6 倍
- 矩阵对角化的并行算法限制了 GPU 在第一原理计算中的应用
- GPU 加速的模式主要适合于分子动力学计算

VASP 的优化与迭代收敛

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun__Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

VASP 计算中，资源消耗的主要部分是求解 Kohn-Sham 方程，即偏微分方程 (Partial Differential Equations, PDE) 的自洽迭代，迭代过程主要包括

- 矩阵的迭代对角化
- 电荷密度的自洽迭代

VASP 的计算高效得益于求解过程中中应用了多种经典优化算法，保证了迭代计算的快速收敛^[3, 4]

- 拟牛顿法 (Quasi-Newton method)
- 共轭梯度法 (Conjugate Gradients method, CG)
- 残差最小化 (RMM-DIIS) 方法

电荷密度混合收敛算法

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

根据 DFT，搜索基态电荷密度的过程就是能量泛函优化的过程，可以通过此前讨论的迭代算法实现：

$$R[\rho_{\text{in}}] = \rho_{\text{out}}[\rho_{\text{in}}] - \rho_{\text{in}}$$

自洽迭代收敛时，残矢模量 $\langle R[\rho_{\text{in}}] | R[\rho_{\text{in}}] \rangle \rightarrow 0$

■ 线性混合：

如果电荷密度自洽迭代的每一步只保留当前步的电荷密度信息，就是线性电荷密度的线性混合

$$\rho_{\text{in}}^{m+1} = \rho_{\text{in}}^m + \gamma R[\rho_{\text{in}}^m]$$

显然，这种线性混合收敛比较慢，应用 Jacobian 矩阵相关的知识，通过选择 Preconditioning 函数，加速自洽迭代的收敛

$$\rho_{\text{in}}^{m+1} = \rho_{\text{in}}^m + \mathbf{G}^{-1} R[\rho_{\text{in}}^m]$$

电荷密度混合收敛算法 (cont.)

■ Kerker 混合:

以平面波为基, 选择的 Preconditioning 函数为

$$G_q^1 = A \frac{q^2}{q^2 + q_0^2} \quad \text{一般取 } A = 0.8, q_0 \text{ 则可根据体系优化}$$

■ Pulay 混合:

优化过程中, 保留此前若干步的输入电荷密度和残矢, 用于迭代的优化电荷密度由此前的电荷密度线性组合得到

$$\rho_{\text{in}}^{\text{opt}} = \sum_i \alpha_i \rho_{\text{in}}^i$$

假设残矢与密度有相同的线性化形式

$$R[\rho_{\text{in}}^{\text{opt}}] = R\left[\sum_i \alpha_i \rho_{\text{in}}^i\right] = \sum_i \alpha_i R[\rho_{\text{in}}^i]$$

电荷密度混合收敛算法 (cont.)

在归一化约束条件 $\sum_i \alpha_i = 1$ 下, 通过最小化残矢模量

$\langle R[\rho_{\text{in}}^{\text{opt}}] | R[\rho_{\text{in}}^{\text{opt}}] \rangle$, 得到优化电荷密度, 可以得到优化系数 α_i

$$a_i = \frac{\sum_j A_{j,i}^{-1}}{\sum_{j,k} A_{j,k}^{-1}} \quad A_{j,k} = \langle R[\rho_{\text{in}}^j] | R[\rho_{\text{in}}^k] \rangle$$

■ Brondley 混合:

这是所有自洽求解 Kohn-Sham 方程方法中最复杂的, 属于准-Newton 类方法。在迭代过程中, 用近似方法不断对 Jacobian 矩阵 (或逆矩阵) 逼近

每次自洽迭代中并不需要保存全部 $N \times N$ 的 Jacobian 矩阵, 只需要存储 N -维矢量

电荷密度混合收敛算法 (cont.)

残矢可以线性化地表示为

$$R[\rho] = R[\rho_{\text{in}}^m] - \mathbf{J}^m(\rho - \rho_{\text{in}}^m)$$

这里 \mathbf{J}^m 是对 Jacobian 矩阵的近似 ($(\mathbf{J}^m)^{-1}$ 是 Jacobian 矩阵的逆阵, 习惯上取 $\mathbf{G}^m = (\mathbf{J}^m)^{-1}$), 由此可有迭代电荷密度

$$\rho_{\text{in}}^{m+1} = \rho_{\text{in}}^m + (\mathbf{J}^m)^{-1} R[\rho_{\text{in}}^m]$$

此类方法因为迭代中 \mathbf{J}^m 的变化形式不同, 可以选择多种方案定义误差函数

$$E = w_0 \|\mathbf{G}^{m+1} - \mathbf{G}^m\|^2 + \sum_{i=1}^m w_i \|\Delta \rho^i + \mathbf{G}^{m+1} \Delta R^i\|^2$$

电荷密度混合收敛算法 (cont.)

这里 $\|A\|^2 = \langle A|A \rangle$, w_i 是权重因子, 并且有

$$\Delta\rho^i = \rho_{\text{in}}^{i+1} - \rho_{\text{in}}^i$$

$$\Delta R[\rho^i] = R[\rho_{\text{in}}^{i+1}] - R[\rho_{\text{in}}^i]$$

- 误差函数的第一项要求 Jacobian 矩阵的逆阵在迭代中变化不大, 并有 $w_0 \rightarrow 0$
- 误差函数的第二项要求模 $\|\Delta\rho^i + \mathbf{G}^{m+1}\Delta R^i\|$ 足够小

电荷密度混合收敛算法 (cont.)

用最小二乘法确定最小化误差，可以确定 \mathbf{G}^m

$$\mathbf{G}^{m+1} = \mathbf{G}^1 - \sum_{k=1}^m |\mathbf{z}_k^m\rangle \langle \Delta R^k|$$

其中

$$|\mathbf{z}_k^m\rangle = \sum_{n=1}^m \beta_{kn} w_k w_n |u^n\rangle + \sum_{n=1}^{m-1} \bar{\beta}_{kn} |\mathbf{z}_n^{m-1}\rangle$$

$$|u^n\rangle = \mathbf{G}^1 |\Delta R^n\rangle + |\Delta \rho^n\rangle$$

而 β_{kn} 和 $\bar{\beta}_{kn}$ 由下式给出

$$\beta_{kn} = (w_0^2 + \bar{A})_{kn}^{-1}, \quad \bar{A}_{kn} = w_k w_n \langle \Delta R^n | \Delta R^k \rangle$$

$$\bar{\beta}_{kn} = \delta_{kn} - \sum_{j=1}^m w_k w_j \beta_{kj} \langle \Delta R^n | \Delta R^j \rangle$$

电荷密度混合收敛算法 (cont.)

VASP 的并
行、迭代算法
和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的
电荷密度混合
与矩阵迭代对
角化

VASP 计算的
原子数据重建

小结

不难看出

$w_0 \rightarrow 0$ 并且 $w_0 \ll w_n$, 该方法就得到 Pulay 方法

而一旦 $w_0 \rightarrow 0$ 时, w_n 的选择, 完全不会影响 G^{m+1} , 因此取 $w_n = 1$ 可有

$$G^m = G^1 - \sum_{k,n=1}^{m-1} \beta_{kn} |u^n\rangle \langle \Delta R^k|$$

而如果令 $w_i = 0$ 并要求 $w_0 \ll w_m$, 有

$$|Z_k^m\rangle = |Z_k^{m-1}\rangle \quad k < m$$

$$|Z_m^m\rangle = \frac{1}{||\Delta R^m||^2} \left(|u^m\rangle - \sum_{k=1}^{m-1} \langle \Delta R^k | \Delta R^m \rangle |Z_k^{m-1}\rangle \right)$$

矩阵的迭代对角化

- 矩阵的直接对角化计算复杂复 $O(N^3)$
- 矩阵的迭代对角化计算复杂度 $O(N_0^2 \times N \ln N)$ $N_0 \ll N$

迭代求本征值的思想是 Jacobian 于 1846 年提出的^[7]
其基本思想是

$$(H - \varepsilon^n)|\psi^n\rangle = |R[\psi^n]\rangle$$

这里 n 是迭代步数, $|\psi^n\rangle$ 和 ε^n 分别是本征态和本征值, $|R[\psi^n]\rangle$ 是残差矢量

在电子态计算过程中, 选择适当的基函数, 可以使 Schrödinger 方程的矩阵接近对角阵 因此可有

$$\begin{aligned} |\psi^{n+1}\rangle &= \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{H} - \varepsilon)|\psi^n\rangle + |\psi^n\rangle = \delta|\psi^{n+1}\rangle + |\psi^n\rangle \\ \mathbf{D}\delta\psi^{n+1} &= R[\psi^n] \end{aligned}$$

这里 \mathbf{D} 是非奇异矩阵, 与 \mathbf{H} 矩阵有关, 也叫“预处理矩阵”, 可根据需要选取多种形式

- 要求 \mathbf{D} 比原始的 $\mathbf{H} - \varepsilon$ 更易求逆阵
- 要求 \mathbf{D} 使得修正项 $\delta\psi^{n+1}$ 能够使 ψ^n 尽可能接近正确的本征矢

矩阵的迭代对角化

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

“预处理矩阵”的作用，是使函数 (泛函) 对变量的依赖趋于“同质” (isotropic)，即函数曲线与不同变量的依赖关系趋同
具体到电子结构求解：

■ 平面波基

基函数 $e^{i\vec{G}_m \cdot \vec{r}}$ 对波函数 $\psi_{\vec{k}_i + \vec{G}}^n(\vec{r})$ 的贡献为 $c_{i,m}^n(\vec{k})$

在能量泛函表达式中，高频 (大的 \vec{G}_m) 部分比低频 (小的 \vec{G}_m) 贡献大得多
preconditioning 要使不同频率对能量泛函贡献趋同：

不同本征矢的修正项趋同，而与相应的能量本征值无关。取

$$K(x) = \frac{27 + 18x + 12x^2 + 8x^3}{27 + 18x + 12x^2 + 8x^3 + 16x^4}$$

此处定义

$$x_i^n(\vec{G}_m) = \frac{1}{2} \frac{|\vec{k} + \vec{G}_m|^2}{E^{\text{kin}}(\mathbf{R}^n)}$$

$x_i^n(\vec{G}_m)$ 表示对 n 次迭代后本征态 i 中平面波组分 $|\vec{k}_i + \vec{G}_m|$ 动能贡献的调整比例

矩阵迭代对角化

稀疏矩阵求解的 Lanczos 优化过程^[8, 9], 只变动一个分量 \mathbf{c}_I 的前提下

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{c}_I} \right|_{\mathbf{c}_I + \delta_I} = 0$$

是可以精确求解的, 其解为

$$\delta_I = (\rho(\mathbf{c}_0) - \mathbf{H}_{II})^{-1} \mathbf{q}_I \quad \text{这里 } \mathbf{q} = (\mathbf{H} - \rho \mathbf{I}) \mathbf{c}_0$$

不难看出, 矢量 \mathbf{q} 就对应 Jacobi 迭代中用于判断收敛的残差矢量
更一般地, 求解方程

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{c}} \right|_{\mathbf{c} + \delta} = 0$$

将方程展开到二阶近似, 不难有

$$(\rho - \mathbf{H}_{II}) \delta_I \approx \mathbf{q}_I + \sum_{J \neq I} \delta_J + (\rho - \lambda) \mathbf{c}_I$$

实际计算中选则 $\delta_I = (\rho(\mathbf{c}_0) - \mathbf{H}_{II})^{-1} \mathbf{q}_I$ 并不是方程的解的好的近似, **好处是计算比较简单**

Block-Davison algorithm

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

Davidson 方法是求解大型稀疏矩阵的少量本征值问题提出来的，结合了 Lanczos 优化和 Jacobi 迭代的优点，简言之就是改进初猜，不用 $\mathbf{H}\mathbf{c}_0$ ，而改用计算简单的 $\delta_I = (\rho(\mathbf{c}_0) - \mathbf{H}_{II})^{-1}\mathbf{q}_I$ 形式

应用 Davison 方法可以快速地依次求解稀疏矩阵的少量本征值和本征矢，将该方法推广为同时求解若干个本征态，即块-Davidson 方法

- 选取合适数目正交归一的向量 $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_n$ 作为初猜子空间的基组，计算并储存向量 $\mathbf{H}\mathbf{c}_i$ 和矩阵元 $\mathbf{H} = \langle \mathbf{c}_i | \mathbf{H} | \mathbf{c}_j \rangle$
- 对角化矩阵，得到本征值 λ^n 和本征矢 \mathbf{a}^n
- 构造残量矢量 $\mathbf{q}_M = (\mathbf{H} - \lambda^{(M)}\mathbf{I})\mathbf{a}^{(M)}$ 其中 $\mathbf{a}^{(M)} = \sum_{i=1}^M a_i^{(M)}\mathbf{a}_i$
- 根据模长 $\|\mathbf{q}_M\|$ 判断迭代收敛情况
- 构造 $\delta_{I,M+1} = (\lambda^{(M)} - \mathbf{H}_{II})^{-1}\mathbf{q}_{I,M}$ ，与此前的基组正交归一化，得到 \mathbf{c}_{M+1}
- 计算矩阵元 $\mathbf{H}_{i,M+1} \quad i = 1, 2, \dots, M+1$
- 对角化矩阵得到新的本征值和本征矢量，继续迭代

RMM-DIIS

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

前述矩阵迭代对角化方法的优化策略都是

- 通过迭代优化得到最小本征值 (极值)
- 利用本征态正交, 依次获得其他各本征态和本征值

RMM-DIIS (Residual Minimization Method by Direct Inversion in the Iterative Subspace)¹方法则可以不用引入正交条件而得到多个本征值, 因为该方法最小化的不是本征值而是残矢

其基本思想概要: 在 n 维 Krylov 子空间内, 生成矢量

$$\psi^{n+1} = c_0 \psi^0 + \sum_{j=1}^{n+1} c_j \delta \psi^j$$

通过改变选取一套合适的系数 c_j 来完成 ψ^{n+1} 的残矢 R^{n+1} 的最小化。等价于 c_j 由 $\{\psi^0, \psi^1, \dots, \psi^n\}$ 构成的 Krylov 子空间内求 Hermitian 本征值问题

$$\sum_{j=1}^n \langle R^i | R^j \rangle c_j = \epsilon \sum_{j=1}^n \langle \psi^i | S | \psi^j \rangle c_j$$

每迭代一次, 子空间引入一个新波函数 ψ 和一个新残矢 $R(\psi)$

- RMM-DIIS 的计算量瓶颈将是后续的逐个矩阵-向量乘操作 $H\psi$
- 只要内存许可, RMM-DIIS 构造的完整的子空间内, 构成子空间的矢量本征值都可以求解出来
- 因为 RMM 方法对初猜的矢量敏感 (矢量收敛的位置到离初猜较近)

¹ RMM-DIIS 的得名源自该方法的提出者 Pulay: 该方法的基本思想是在历次迭代产生的矢量构成的完整 Krylov 子空间内, 完成对残矢的最小化

VASP 计算的原子数据基础

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

POTCAR 提供了 VASP 计算所需的原子数据，也是实现 PAW 方法的主要基础

- POTCAR 是 VASP 实现材料精确计算的重要保证
同样都应用 PAW 方法，公认 VASP 较 QE、ABINIT 等软件的计算精度要高
- POTCAR 数据生成依赖较多的可调参数
包括能量参数 ε_l 、多种截断半径 r_c 、 r_{vloc} 、 r_{shape} 、 r_{core}
- POTCAR 数据生成代码是 VASP 中唯一没有公开的
- 用 VASP 模拟极端条件下材料物性的能力，受到 POTCAR 数据的制约

当前研究主要尝试基于开源的 PAW 赝势生成软件 (atomPAW)，开发能生成 POTCAR 原子数据的功能

PAW 原子数据集: wave function

平滑赝原子分波函数

$$\tilde{\phi}_{i=Lk}(\vec{r}) = Y_L(\widehat{\vec{r} - \vec{R}}) \tilde{\phi}_{lk}(|\vec{r} - \vec{R}|)$$

根据 RRKJ 赝势构造的思想, 赝分波函数由球 Bessel 函数线性组合

$$\tilde{\phi}_{lk}(r) = \begin{cases} \sum_{i=1}^2 \alpha_i j_l(q_i r) & r < r_c^l \\ \phi_{lk}(r) & r > r_c^l \end{cases}$$

调节系数 α_i 和 q_i 赝分波函数 $\phi_{lk}(r)$ 在截断半径 r_c^l 处两阶连续可微

PAW 原子数据集: wave function

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

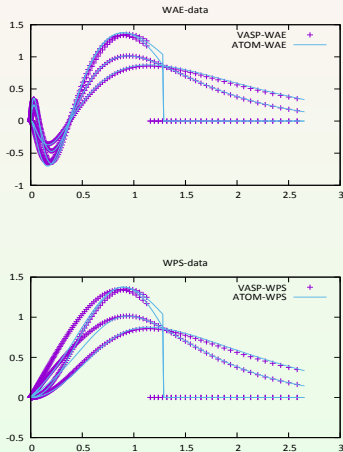


Fig.: The partial wave function.

PAW 原子数据集: core density

构造赝芯电荷密度 \tilde{n}_c : 在截断半径 r_{core} 内的定义为

$$\sum_{i=1,2} B_i \frac{\sin(q_i r)}{r} \quad r < r_{\text{core}}$$

调节系数 q_i 和 B_i 使得赝芯电荷密度 $\tilde{n}_c(r)$ 在截断半径 r_{core} 处的两阶导数连续

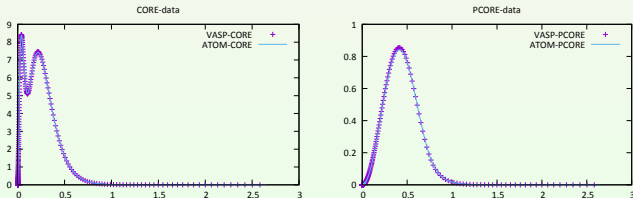


Fig.1 The core density.

PAW 原子数据集: $v_{eff}(r)$ 与 $\tilde{v}_{eff}(r)$

VASP 的并行、迭代算法和赅势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

原子局域有效势 v_{eff}^a

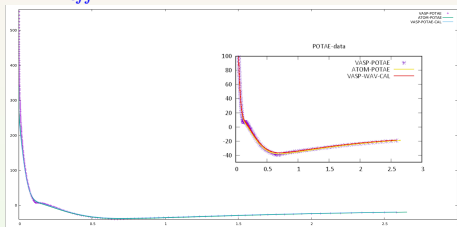


Fig.1 The local atomic effective-Potential.

构造原子局域赅势 \tilde{v}_{eff}^a : (在截断半径 r_{loc} 内的定义)

$$\tilde{v}_{eff}^a = A \frac{\sin(q_{loc}r)}{r} \quad r < r_{loc}$$

其中 q_{loc} 和 A 要求局域赅势在截断半径 r_{loc} 处连续到一阶导数

PAW 原子数据集: $v_H[\tilde{n}_{Zc}]$

局域离子赝势 $v_H[\tilde{n}_{Zc}]$ 可由原子局域赝势去屏蔽得到

$$v_H[\tilde{n}_{Zc}] = \tilde{v}_{eff}^a - v_H[\tilde{n}_a^1 + \hat{n}_a] - v_{XC}[\tilde{n}_a^1 + \hat{n}_a + \tilde{n}_c]$$

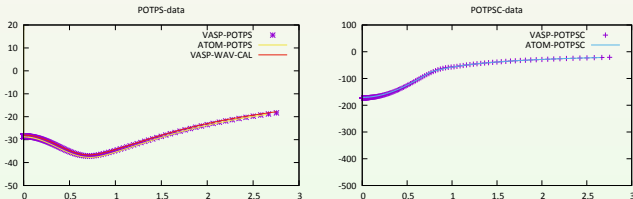


Fig.: The pseudo-potential and local ionic pseudo-potential.

PAW 原子数据集: \tilde{n}_G

局域离子赝势 \tilde{n}_G 可由原子局域赝密度的 FFT 得到

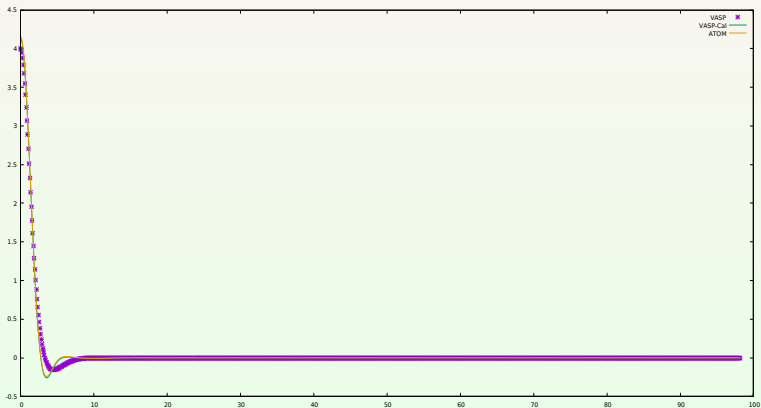


Fig.: The pseudo-density in reciprocal space.

PAW 原子数据集: $v_G[\tilde{n}_{Zc}]$

局域离子赝势在倒空间的表示 $v_G[\tilde{n}_{Zc}]$ 可由原子去屏蔽局域赝势的 FFT 得到

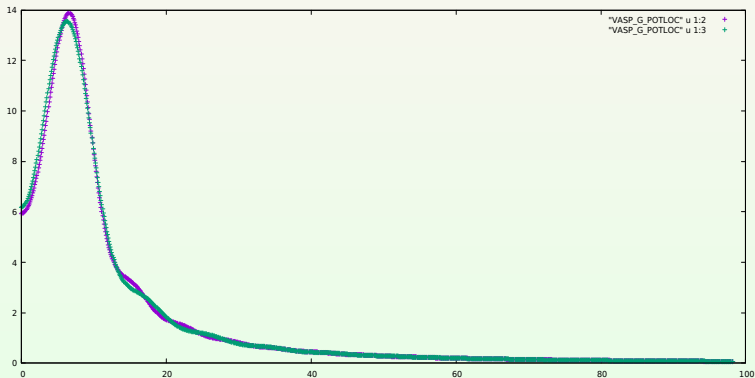


Fig.: The local ionic pseudo-potential in reciprocal space.

小结

VASP 的并行、迭代算法和瓶颈

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

作为第一性原理计算的商用软件，VASP 已成为计算材料学领域应用最广泛的软件之一。全球绝大多数超算中心都安装了 VASP，据统计，VASP 软件的作业机时占用全球总机时的 12~20%，但由于其属于重型浮点计算密集型应用，实际耗电量占比则高达 30~50%

- **物理上**，VASP 基于 DFT 近似，求解 Kohn-Sham 方程，并将粒子基态密度问题转化为矩阵的本征函数和本征值问题
- **数学上**，方程求解过程的核心是矩阵对角化与 PDE 的自洽迭代，即便对于简单体系，也需要完成数十次的迭代，而规模大的计算模拟体系则可能需要成千上万次迭代计算
- **计算过程上**，VASP 计算的时长开销主要是本征值求解的矩阵对角化；此外由于算法限制，Kohn-Sham 方程作为线性方程组作并行处理时，节点间存在密集的通信。在上千节点，上万计算核的大规模并行系统上，数据通信将严重影响程序的性能，这是当前 VASP 软件的主要瓶颈

主要参考文献

- [1] P. E. Blöchl. *Phys. Rev. B*, **50** (1994), 17953
- [2] G. Kresse and D. Joubert *Phys. Rev. B*, **59** (1999), 1758
- [3] G. Kresse and J. Furthmüller *Comput. Mat. Sci.*, **6** (1996), 15
- [4] G. Kresse and J. Furthmüller *Phys. Rev. B*, **54** (1996), 11169
- [5] R. Car and M. Parrinello *Phys. Rev. Lett.*, **55** (1985), 2471
- [6] K. Laasonen and A. Pasquarello and R. Car and C. Lee and D. Vanderbilt *Phys. Rev. B*, **47** (1993), 10142
- [7] C. G. Jacobi, **Über ein leichtes Verfahren die in der Theorie der Säculärstörungen vorkommenden Gleichungen numerisch aufzulösen**, *Crelle's J.* **30** (1846), 51-94
- [8] Richard. M. Martin. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2004)
- [9] J. M. Thijssen. *Computational Physics* (2nd Edition) (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2007)

VASP 的并行、迭代算法和赝势

Jun_Jiang

VASP 软件

VASP 中的电荷密度混合与矩阵迭代对角化

VASP 计算的原子数据重建

小结

谢谢大家！