

Алгоритм CROP для ускорения сходимости итерационной процедуры решения уравнений релятивистского метода связанных кластеров

А.С. Румянцев¹, А.В. Олейниченко¹, А.В. Зайцевский¹, А.В. Титов¹

E-mail: attoatom@gmail.com

¹*Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина, Россия*

Теоретический потенциал исследования материалов с лантаноидами и актиноидами, как правило, ограничивается теорией функционала плотности и нерелятивистскими подходами для описания периодических структур. Перечисленные методы в большинстве случаев не позволяют получать надежных результатов, так как волновые функции для соединений f-элементов часто имеют ярко выраженный многоконфигурационный характер, а для спектра состояний характерна высокая плотность низколежащих электронных состояний. Релятивистские методы связанных кластеров для многомерного модельного пространства (MR-CC) позволяют решить эту проблему.

Данная работа посвящена реализации вычислительных алгоритмов, позволяющих улучшить сходимость итерационных процедур решения амплитудных уравнений метода связанных кластеров.

На сегодняшний день для ускорения сходимости итерационной процедуры широко используется алгоритм DIIS. Однако при рассмотрении моделей с высокой вычислительной сложностью, в частности, явно учитывающих вклады трехкратных возбуждений, данный алгоритм требует большого объема оперативной памяти для хранения значений амплитуд на предыдущих итерациях. Для решения данной проблемы в работе [1] был предложен алгоритм CROP. В рамках этого подхода итеративное подпространство может быть сведено к трехмерному без потери скорости сходимости относительно DIIS. Метод CROP был реализован в пакете программ EXP-T [2]. Продемонстрировано, что метод CCSD с использованием DIIS и CROP обладает одинаковой скоростью сходимости, при этом для алгоритма CROP хранилось три значения амплитуд по сравнению с десятью для DIIS. Тесты проводились для воды и AsO⁺.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 19-72-10019

1. Ettenhuber P., Jørgensen P. Discarding information from previous iterations in an optimal way to solve the coupled cluster amplitude equations // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. PP. 1518–1524.
2. Oleynichenko A. V., Zaitsevskii A. V., Eliav E. Towards High Performance Relativistic Electronic Structure Modelling: The EXP-T Program Package // Commun. Comput. Inf. Sci. 2020. V. 1331. PP. 375–386.