基于密度泛函理论的电子结构
有限元并行自适应算法

沈丽华

摘　　要

针对电子结构计算中一类重要的方程——Kohn-Sham 方程，本文提出了一种基于有限元方法的并行自适应算法. 我们首先讨论了线性 Schroedinger 方程有限元逼近的收敛性、后处理技术、后验误差分析以及自适应算法，然后分别为线性 Schroedinger 方程和 Kohn-Sham 方程设计了一类并行自适应有限元算法. 对于线性 Schroedinger 方程，我们给出了算法的理论分析. 而对 Kohn-Sham 方程，我们用一组数值实验来证明算法的有效性. 事实上，这类并行自适应算法网格分配的优越性和高度的并行性，使得它成为一很有应用潜力的电子结构计算方法.

关键词：电子结构计算，密度泛函理论，Kohn-Sham 方程，有限元方法，自适应算法，并行算法，后验误差估计