第一原理电子结构计算的有限元自适应及局部算法研究

戴小英

摘要

本文围绕基于密度泛函理论的第一原理电子结构计算的有限元方法这一课题进行了相关研究，包括算法设计、分析、实现与应用．首先，针对一般线性特征值问题，对其有限元自适应算法的收敛性和复杂度进行了系统的分析．我们证明了一般特征值问题有限元自适应过程在能量范数下是线性收敛的，并具有最优的复杂度．其次，针对形如第一原理计算中出现的特征函数局部振荡的特征值问题，我们设计了几类高效的多水平有限元局部离散格式，包括双尺度有限元局部离散格式、三尺度有限元局部离散格式以及局部高阶有限元格式．运用这些格式，我们将大规模特征值问题的求解分解为小规模特征值问题的求解及一些局部子区域上边值问题的求解．这些格式既拥有理想的逼近精度，又大大减少计算量，而且还有良好的并行本性．特别地，我们还设计并实现了第一原理电子结构计算的有限元并行自适应与局部离散程序，并将之应用到几类典型的量子化学与纳米材料计算中．这套程序目前能在数十上百个处理器上进行数百个原子系统的第一原理电子结构计算．