# 第一原理电子结构计算的六面体有限元方法

高兴誉

**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研究, 包括算法设计、分析、实现与应用. 在算法设计与分析方面, 我们对一类椭圆特征值问题设计并分析了天然可并行的三尺度有限元组合离散格式. 在程序实现与应用方面, 我们有效地处理了局部加密立方体网格产生的悬挂点, 实现了基于六面体有限元自适应的电子结构计算. 为提高计算效率, 我们基于赝波函数构造了初始电荷密度, 并通过对它的后验误差估计自适应地生成了初始网格. 目前, 我们选取初值的六面体有限元自适应程序已经能够在微机上完成数百个原子系统的第一原理计算. 作为一种有益的尝试, 我们设计并实现了基于六面体有限元自适应的并行成分模式合成算法, 并应用这种对特征值问题的区域分解方法求解了十几个原子体系的Kohn-Sham方程, 讨论了该算法的可行性.

**关键词:** 第一原理计算, 电子结构, 密度泛函理论, Kohn-Sham方程, 三尺度, 六面体有限元, 自适应计算, 区域分解, 成分模式合成.