密度泛函理论的有限维逼近

陈华杰

摘要

本文研究的是密度泛函理论中基态解的有限维逼近, 包括算法的设计、分析、实现和应用. 在分析方面, 我们研究密度泛函理论中的无轨道模型和 Kohn-Sham 方法导出的两类非凸非线性特征值问题基态解的有限维逼近. 对无轨道模型导出的非线性特征值问题, 我们证明了基态解有限维逼近的收敛性, 给出了先验误差的上界估计. 另外, 我们还给出了这类非线性特征值问题有限元逼近的后验误差估计, 证明了基态解自适应有限元逼近的收敛性. 对 Kohn-Sham 方程这类需要求解多维特征子空间的非线性特征值问题, 我们也证明了基态解有限维逼近的收敛性, 并在较弱的同构假设下证明了 H^1 范数的最优先验误差估计. 我们还针对一类后验误差估计子, 证明了 Kohn-Sham 方程基态解自适应有限元逼近的收敛性. 在算法设计方面, 我们基于密度泛函理论, 通过直接极小化方法设计并实现了电子结构并行自适应有限元计算程序, 并将之应用到典型的晶格材料和分子体系的计算中. 特别地, 我们基于无轨道方法的程序目前已能在数十上百个处理器上对数千个原子的典型晶格体系进行成功的数值模拟.

关键词: 电子结构, 密度泛函理论, 无轨道模型, Kohn-Sham 方程, 有限元方法, 双尺度离散, 非线性特征值问题, 有限维逼近, 收敛性, 先验误差估计, 并行自适应算法, 直接极小化方法.