电子结构的梯度流模型及其计算

王乔

摘 要

电子结构计算是材料科学和量子化学等领域中的重要课题，而非线性特征值问题是其典型的计算模型，收敛的自洽场迭代方法是求解这类非线性特征值问题的关键．在本文中，我们提出并分析了基于梯度流模型的离散 Kohn-Sham 密度泛函理论．在较弱并符合实际情况的假设下，探讨了该梯度流模型的渐进行为，分析了由中点时间格式产生的迭代序列的收敛性、收敛率以及保正交性；基于近似中点时间格式，我们构造了一类自洽场迭代算法，证明了该迭代是收敛的并具有一定的收敛率．我们的收敛条件是相当弱的且符合实际情况：在能量极小点附近第 $(N+1)$ 个特征值和所需的第 N 个特征值之间有谱隙即可．与约束优化模型对应的迭代法相比，我们的自洽场迭代法计算量要小很多．我们还在有限元空间离散下实现了我们的模型与算法的测试，数值结果表明我们的模型与算法是可行的.

关键词：电子结构，第一原理计算，Kohn-Sham 密度泛函理论，梯度流模型，正交约束，能量极小，中点格式，自洽场迭代，有限元离散