# 摘 要

Kohn-Sham 方程或 Hartree-Fock 方程是第一原理电子结构计算的核心数学模型. 这两类方程都是算子含奇性且具有非局域性的非线性特征值问题. 算子的奇性使得特征函数在奇点附近变化剧烈, 从而使得有限维逼近时逼近解的精度大受影响. 本文主要通过氢原子 Schrödinger 方程研究在使用有限元方法离散这类方程时如何合理布置初始网格达到可以使用高次的有限元来有效的离散氢原子 Schrödinger 方程的目的. 受已有的正则性分析结果启发, 我们将算子奇点位置作为初始网格的一个顶点, 理论上可以使用任意次数的有限元来离散氢原子 Schrödinger 方程. 为了从数值上验证这一点, 本文分别从模型误差、数值误差和逼近误差三个方面分析了氢原子 Schrödinger 方程有限元求解的误差来源. 并通过一些方法分别实现减少模型误差及数值误差, 特别设计了两种积分策略来抑制奇异积分导致的积分误差, 最终得到了逼近误差随有限元次数的提高的变化曲线. 数值结果在很大程度上验证了我们的结论.

**关键词：** 第一原理, 电子结构, Schrödinger 方程, 有限元离散, 逼近误差, 自适应, 奇性