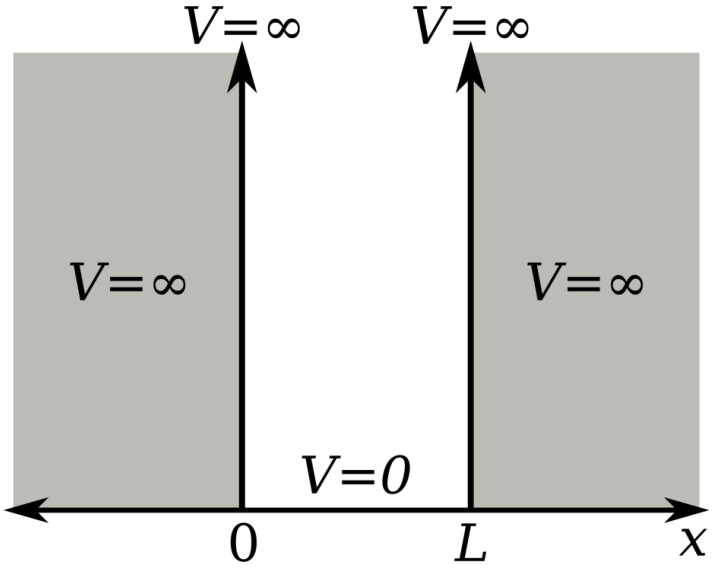
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М. В. ЛОМОНОСОВА
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

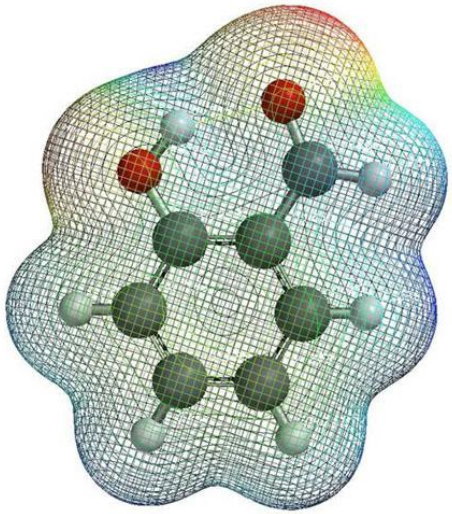
Курсовая работа по дисциплине
"Параллельное программирование"

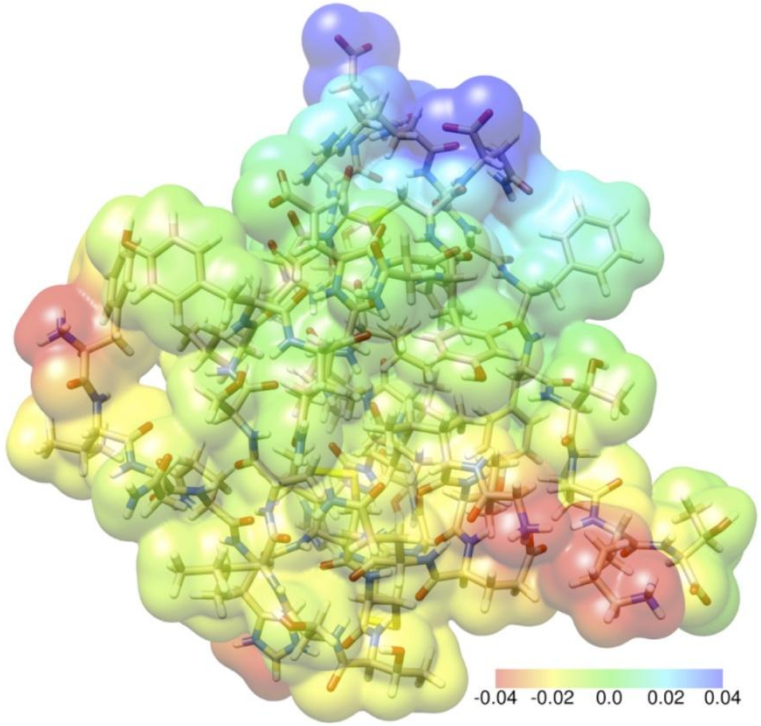
Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера для произвольного потенциала на трехмерной прямоугольной сетке

Выполнила:
студентка 202 группы
Крюкова Екатерина

Постановка задачи







Уравнение Шрёдингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y,z)\Psi$$

- Стационарное уравнение Шрёдингера

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + [E - U(x,y,z)]\psi = 0$$

Численное моделирование

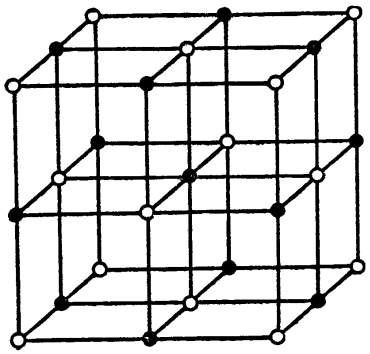
- Сведение физической задачи к задаче линейной алгебры

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{i+1,j,k} + \psi_{i-1,j,k} - 2\psi_{i,j,k}}{d^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = \frac{\psi_{i,j+1,k} + \psi_{i,j-1,k} - 2\psi_{i,j,k}}{d^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{\psi_{i,j,k+1} + \psi_{i,j,k-1} - 2\psi_{i,j,k}}{d^2}.$$



$$-(\psi_{i+1,j,k} + \psi_{i-1,j,k} + \psi_{i,j+1,k} + \psi_{i,j-1,k} + \psi_{i,j,k+1} + \psi_{i,j,k-1}) + \\ + (u_{i,j,k} + 6)\psi_{i,j,k} = \varepsilon\psi_{i,j,k}.$$

$$\boxed{C\mathbf{v} = \varepsilon\mathbf{v}}$$

Численное моделирование

- Матрица C – симметричная разреженная матрица

N = 3, 2D

$$
\begin{pmatrix}
u+4 & -1 & & -1 & & & & & \\
-1 & u+4 & -1 & & -1 & & & & \\
 & -1 & u+4 & -1 & & -1 & & & \\
-1 & & -1 & u+4 & -1 & & -1 & & \\
 & -1 & & -1 & u+4 & -1 & & -1 & \\
 & & -1 & & -1 & u+4 & -1 & & -1 \\
 & & & -1 & & -1 & u+4 & -1 & \\
 & & & & -1 & & -1 & u+4 & -1 \\
 & & & & & -1 & & -1 & u+4
\end{pmatrix}
$$

Численное моделирование

Нахождение собственных векторов и собственных значений симметричной матрицы

- Спектральное разложение $A = U \Lambda U^T$

$$U^T U = U U^T = I_n$$

$$\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$$

parallel

Матрица A → Процесс Ланцоша → Трехдиагональная матрица T → Метод бисекции → Спектральное разложение T → Метод инверсных итераций → Спектральное разложение A

Численное моделирование

- Симметричный процесс Ланцоша

Algorithm 1: Симметричный процесс Ланцоша

Вычислить $\beta_1 = ||\mathbf{r}||$, положить $\mathbf{v}_1 \leftarrow \mathbf{r}/\beta_1$ и $\mathbf{v}_0 \leftarrow \mathbf{0}$

for $j = 1, 2, \ldots$ **do**

1) Вычислить $\mathbf{v} = C\mathbf{v}_j$ и положить $\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{v} - \mathbf{v}_{j-1}\beta j$.

2) Вычислить $\alpha_j = \mathbf{v}_j * \mathbf{v}$ и положить $\mathbf{v} \leftarrow \mathbf{v} - \mathbf{v}_j \alpha j$.

3) Вычислить $\beta_{j+1} = ||\mathbf{v}||$.

if $\beta_{j+1} = 0$ **then** stop;

else $\mathbf{v}_{j+1} \leftarrow \mathbf{v}/\beta_{j+1}$;

end

$$V_j = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \ldots & \mathbf{v}_j \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{e}_j^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boxed{CV_j = V_j T_j + \beta_{j+1}\mathbf{v}_{j+1}\mathbf{e}_j^T \approx V_j T_j.}$$

$$T_j = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \ldots & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \beta_3 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta_j \\ 0 & \vdots & 0 & \beta_j & \alpha_j \end{pmatrix}$$

$\lambda_i^{(j)}$ матриц T_j и C совпадают

Численное моделирование

- Метод бисекции

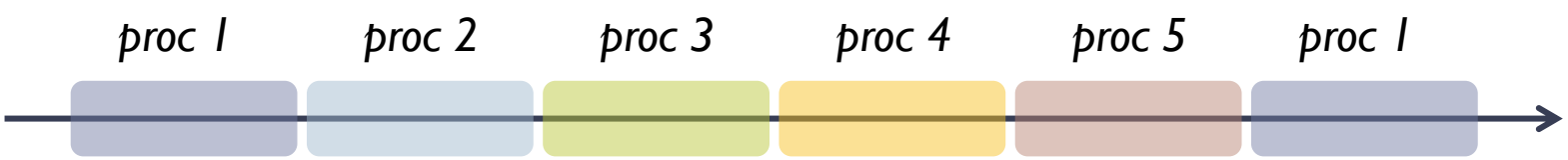
parallel

$$A - zI = LDL^T$$

Inertia(A - zI) = Inertia(D)

- Число СЗ в $[z_1, z_2)$: Negcount(A, z_2) - Negcount(A, z_1)

- Параллельная программа (OpenMP)

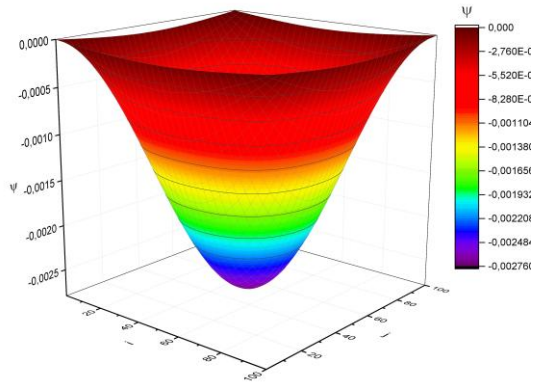


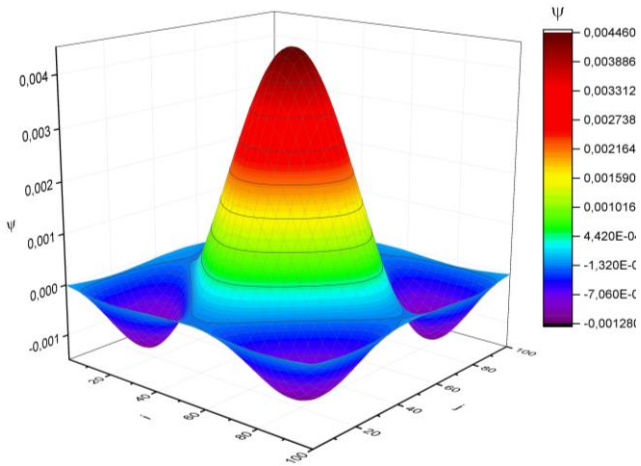
Результаты. Яма с нулевым потенциалом

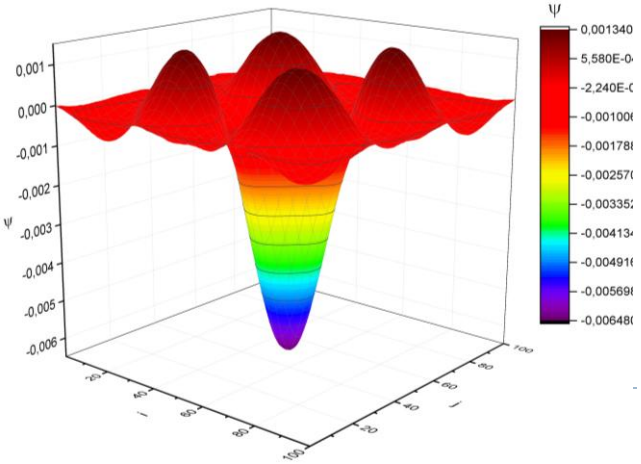
- Точное решение

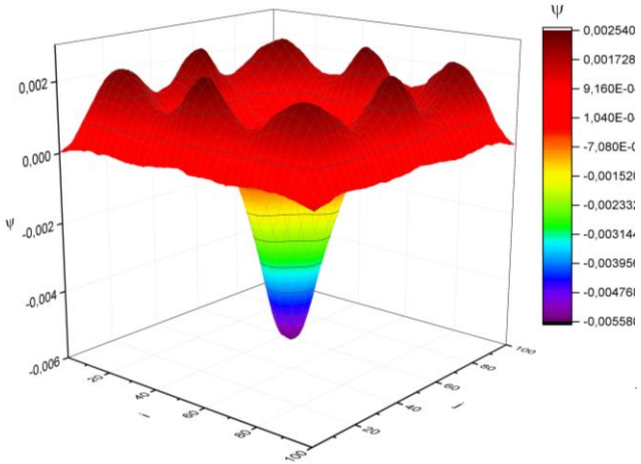
$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = C\sin(k_{x,n_x}x)\sin(k_{y,n_y}y)\sin(k_{z,n_z}z) \qquad E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2_{x,n_x} + k^2_{y,n_y} + k^2_{z,n_z}).$$

$$k_{x,n_x} = \frac{\pi n_x}{a}, \qquad k_{y,n_y} = \frac{\pi n_y}{b}, \qquad k_{z,n_z} = \frac{\pi n_z}{c}.$$



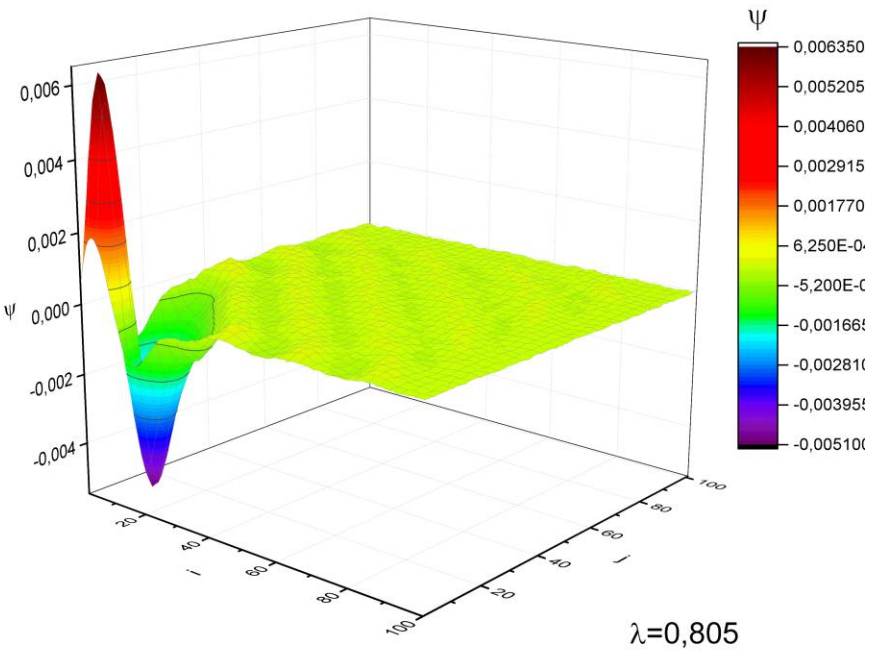


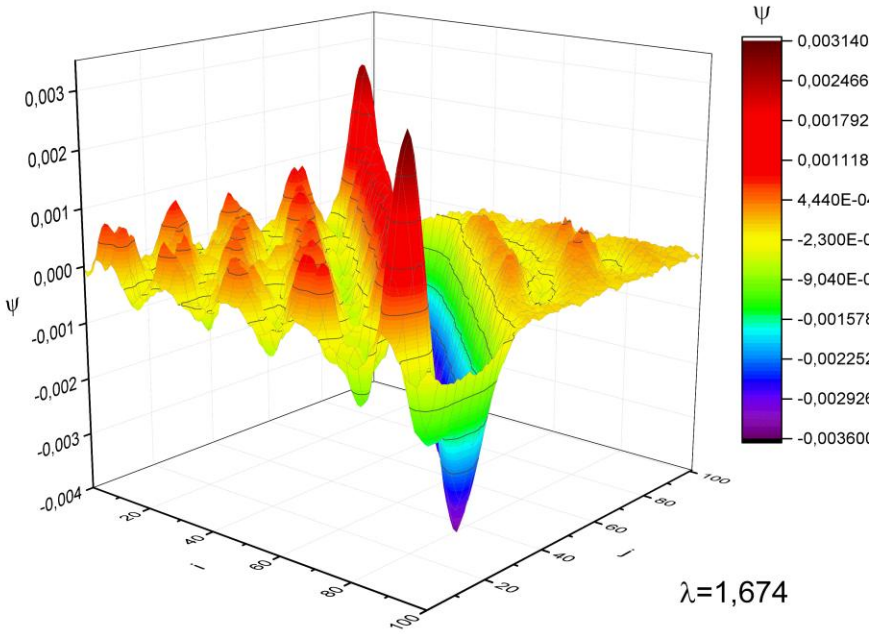




Результаты. Нетривиальная задача

- U(x, y, z) = C (x + y + z)



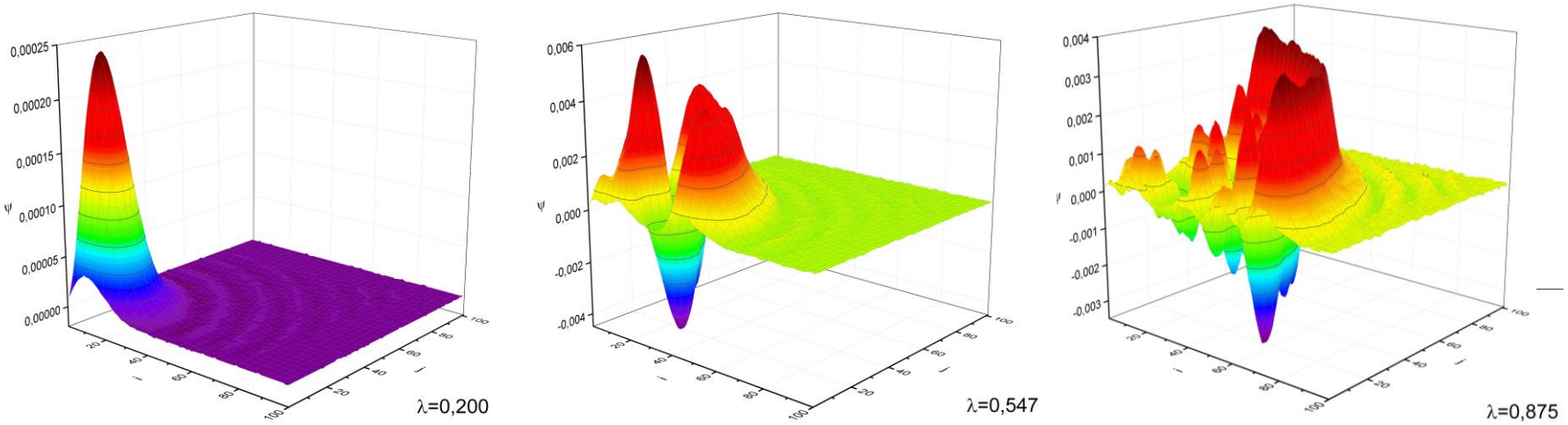


Результаты. Гармонический осциллятор

- $U(x, y, z) = C\,(x^2+y^2+z^2)$
- Точное решение для одномерного случая

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)$$

где $H_n(x)$ – полиномы Эрмита: $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$

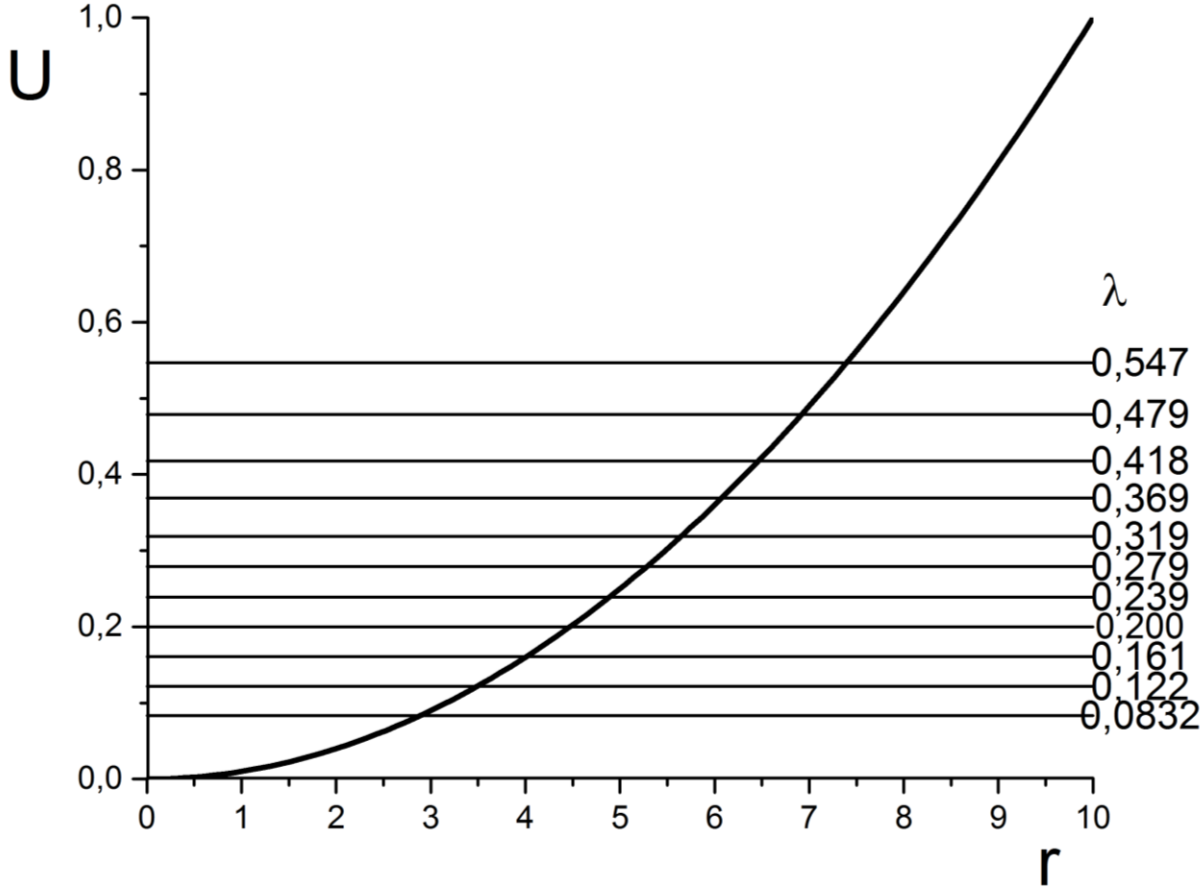


Результаты. Гармонический осциллятор

- Собственные значения энергии E_n

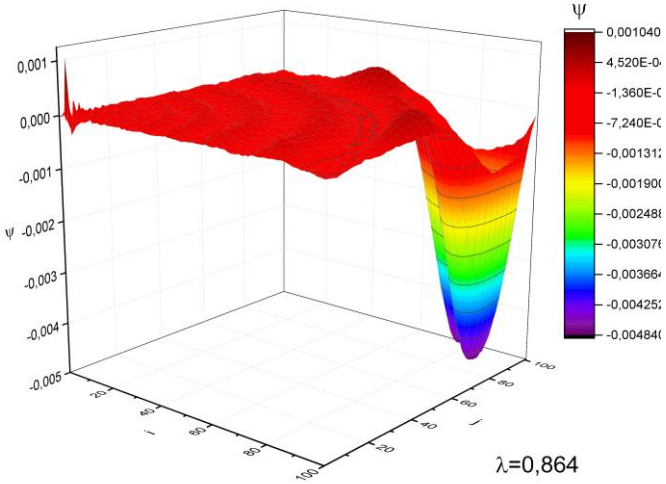
$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \ , \ n = 0, 1, 2, \ldots$$

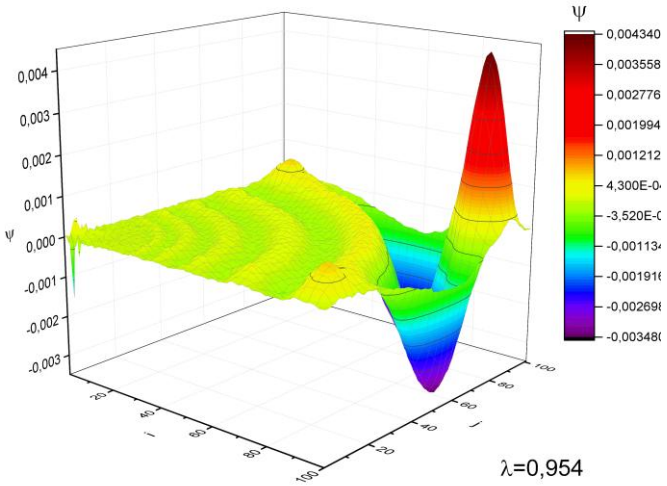
Рассчитанные значения энергии эквидистантны при малых n

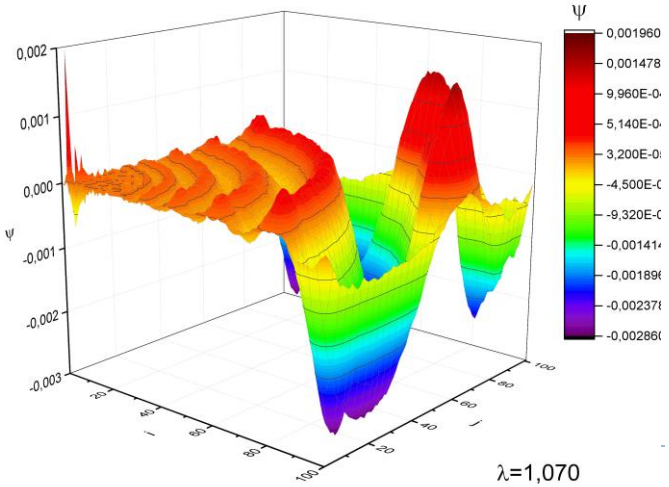


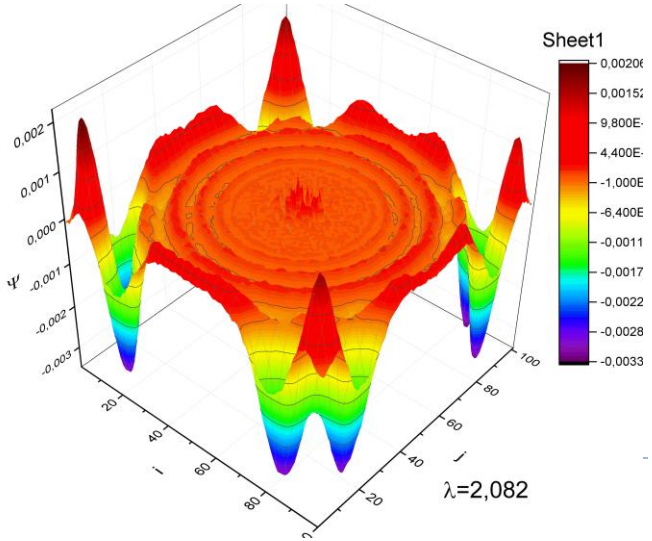
Результаты. Пробная частица в поле одноимённого заряда

- U(r) = C/r



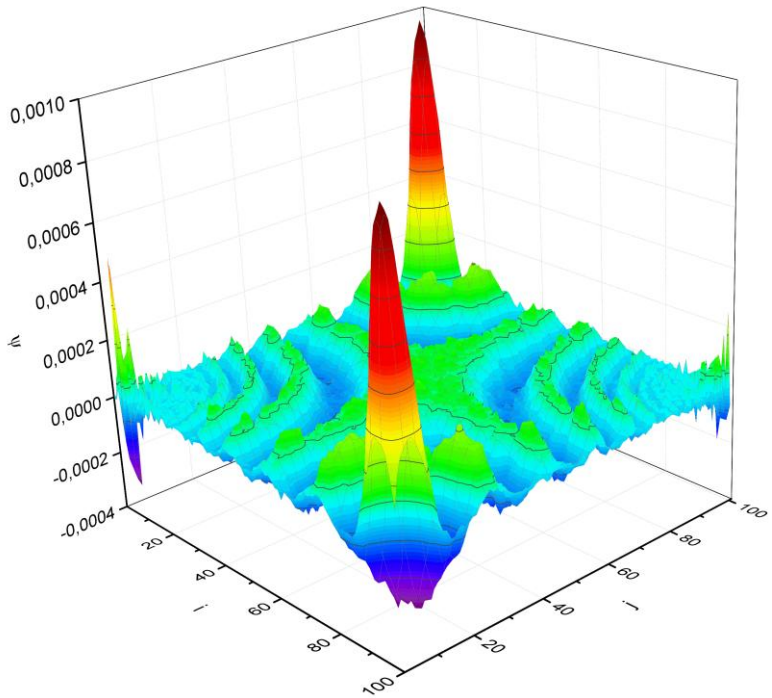


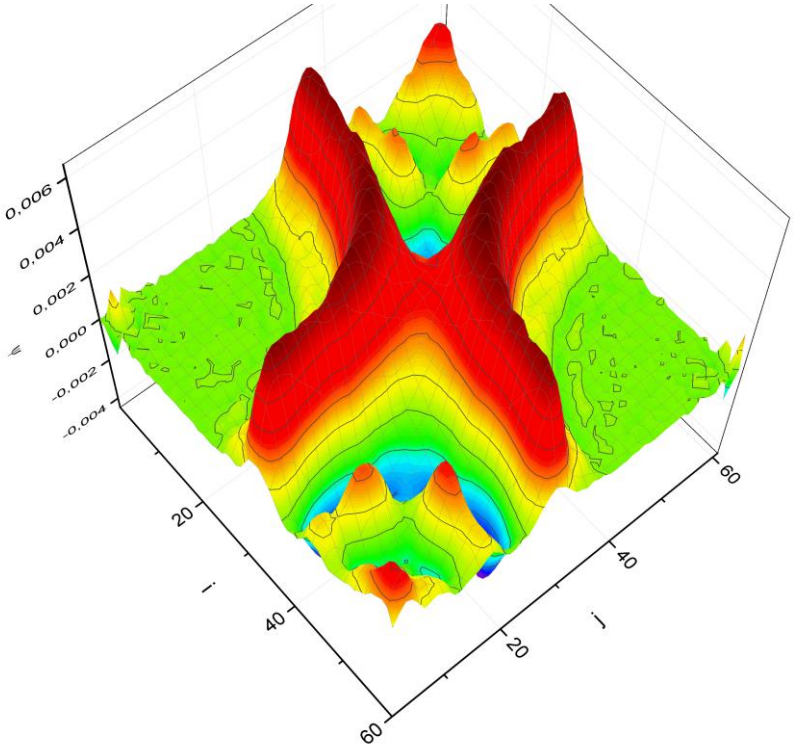




Результаты. Пробная частица в поле двух одноимённых зарядов

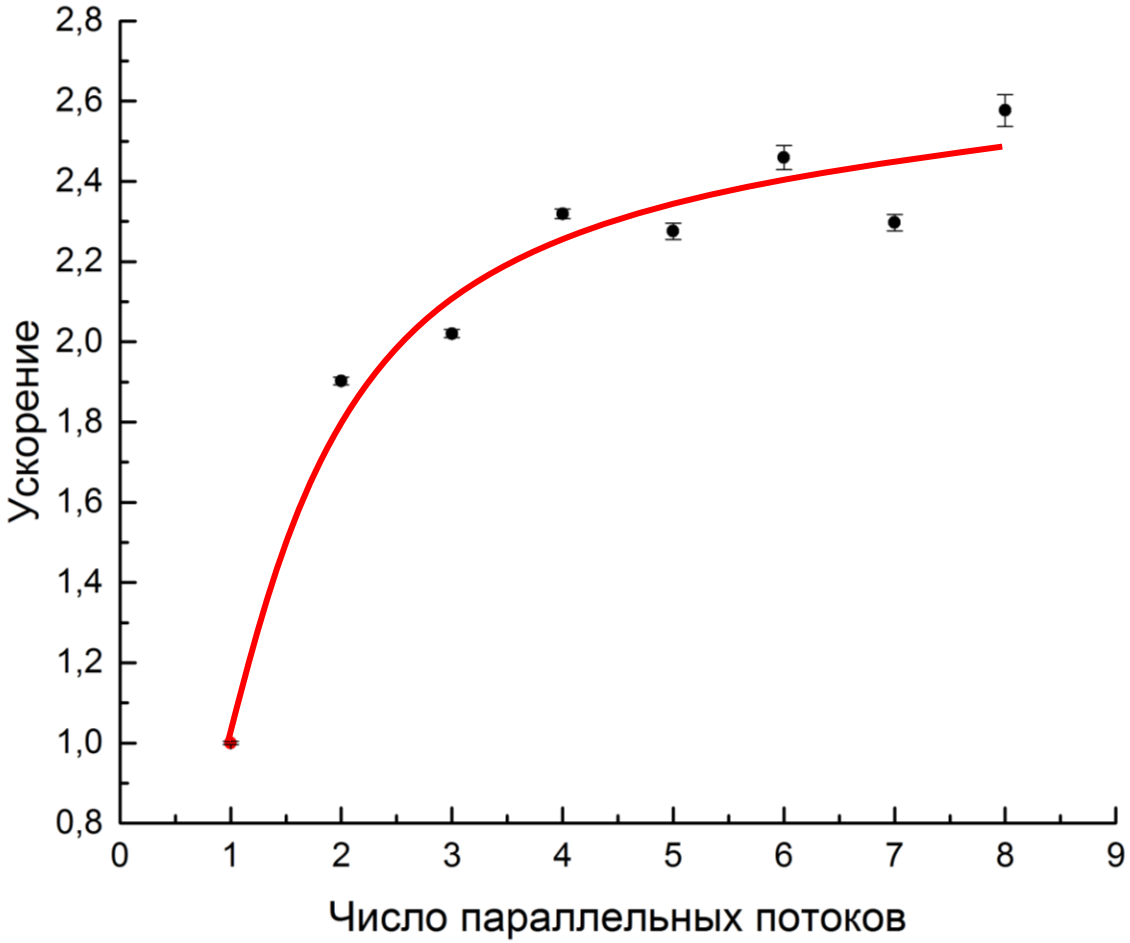
- $U(r) = C/r_1 + C/r_2$





Результаты оптимизации

Параллельная часть программы занимает 90% по времени при исполнении на 1 процессоре



Выводы

- написана программа, позволяющая за приемлемое время численно решать уравнение Шрёдингера для любого вида потенциала
- использованы несколько современных численных методов нахождения собственных значений и собственных функций
- использована технология параллельного программирования OpenMP
- представлены результаты, соответствующие ожиданиям