

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 2 курса группы 202
Крюкова Екатерина Андреевна

Москва, 2017 г.

Содержание

1	Введение	2
2	Теория	3
3	Численное моделирование	4
3.1	Сведение физической задачи к задаче линейной алгебры	4
3.2	Свойства матрицы C	5
3.3	Процедура нахождения собственных векторов и собственных значений .	5
3.3.1	Симметричный процесс Ланцоша	6
3.3.2	Методы спектрального разложения для трехдиагональных матриц	6
3.3.3	Метод бисекции	7
3.4	Использование технологий параллельного программирования	7
4	Результаты	9
4.1	Яма с нулевым потенциалом	9
4.2	Нетривиальная задача	10
4.3	Гармонический осциллятор	10
4.4	Пробная частица в поле одноимённого заряда	14
4.5	Пробная частица в поле двух одноимённых зарядов	14
5	Результаты оптимизации	15
6	Выводы	16

1 Введение

Описание многих микроскопических систем возможно только в рамках квантовой механики. Данный подход находит применение не только в идеализированных физических задачах: описанием строения атомов и молекул, распределения в них электронной плотности занимается квантовая химия. При этом аналитическое решение соответствующих задач встречается достаточно редко. Практическое значение этой области науки велико: основанное на компьютерных вычислениях распознавание активных центров молекул и объяснение их функций позволяют людям создавать новые лекарства и материалы.

Задача математического описания реальных систем достаточно сложна, поэтому мы ограничимся её простейшими случаями. Рассмотрим трехмерную прямоугольную потенциальную яму с бесконечными стенками и поместим в неё пробную частицу массы m . Пусть задана потенциальная энергия U как функция координат x, y, z . Основываясь на уравнениях квантовой механики, будем искать состояния частицы в потенциальной яме.

2 Теория

Движение нерелятивистской частицы в потенциальном поле в квантовой механике описывается уравнением Шрёдингера. [1]

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(x, y, z) \Psi. \quad (1)$$

Здесь m – масса частицы, $U(x, y, z)$ – её потенциальная энергия во внешнем поле, Ψ – её волновая функция.

Стационарное уравнение Шрёдингера описывает состояния системы, в которых энергия принимает определённые значения:

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

Решения этого уравнения ψ_n называются собственными функциями системы, а соответствующие значения параметра E_n – собственными значениями энергии. Известно, что при финитном движении частицы (например, в потенциальной яме) собственные значения E_n образуют дискретный спектр. Гамильтониан (оператор полной энергии системы) является эрмитовым [1], поэтому его собственные значения E_n оказываются действительными числами, а его матрица является эрмитовой матрицей. Это будет использовано нами в дальнейшем.

Уравнение (2) – дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных, его точные решения известны лишь для простейших симметричных потенциалов $U(x, y, z)$. Во многих практически важных случаях (например, решения (2) для атомов и молекул в квантовой химии) приходится прибегать к численным методам. [5]

Приведём решение уравнения Шрёдингера для простейшего случая трехмерной прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0, & (x, y, z) \in [0, a] \times [0, b] \times [0, c] \\ \infty, & (x, y, z) \notin [0, a] \times [0, b] \times [0, c] \end{cases}.$$

Исходя из симметрии задачи, можем представить волновую функцию в виде произведения функций одной переменной:

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z).$$

Тогда уравнение (2) переходит в уравнение вида

$$\psi_x'' + k_x^2 \psi_x = 0, \quad (3)$$

аналогично для ψ_y и ψ_z . С учетом граничных условий $\psi_x(0) = 0$, $\psi_x(a) = 0$, решение (3) может быть записано как:

$$\psi_{x,n} = C_x \sin k_{x,n} x, \quad k_{x,n} = \frac{\pi n}{a}.$$

Искомая волновая функция

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = C \sin(k_{x, n_x} x) \sin(k_{y, n_y} y) \sin(k_{z, n_z} z) \quad (4)$$

$$k_{x, n_x} = \frac{\pi n_x}{a}, \quad k_{y, n_y} = \frac{\pi n_y}{b}, \quad k_{z, n_z} = \frac{\pi n_z}{c}. \quad (5)$$

Собственные значения энергии

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_{x, n_x}^2 + k_{y, n_y}^2 + k_{z, n_z}^2). \quad (6)$$

Будем использовать это решение для проверки корректности работы программы.

3 Численное моделирование

3.1 Сведение физической задачи к задаче линейной алгебры

Как уже было отмечено, стационарное уравнение Шрёдингера в общем виде не имеет точного решения. Поэтому в ряде случаев приходится использовать численные методы. Уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi \quad (7)$$

является дифференциальным уравнением второго порядка в частных производных, следовательно для его приближенного решения применим метод конечных разностей.

Рассмотрим поставленную задачу на трехмерной сетке (x_i, y_j, z_k) с шагом по каждому измерению d и размерами $N \times N \times N$. В узлах сетки определим значения сеточных функций $\psi_{i,j,k} = \psi(x_i, y_j, z_k)$ и $U_{i,j,k} = U(x_i, y_j, z_k)$. Оператор Лапласа в декартовых координатах представим в виде

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}. \quad (8)$$

Выразим вторые частные производные с помощью разностной схемы "крест":

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\psi_{i+1,j,k} + \psi_{i-1,j,k} - 2\psi_{i,j,k}}{d^2} \quad (9)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = \frac{\psi_{i,j+1,k} + \psi_{i,j-1,k} - 2\psi_{i,j,k}}{d^2} \quad (10)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{\psi_{i,j,k+1} + \psi_{i,j,k-1} - 2\psi_{i,j,k}}{d^2}. \quad (11)$$

Подставляя (9), (10), (11) в (7), получаем:

$$-\frac{\hbar^2}{2md^2}(\psi_{i+1,j,k} + \psi_{i-1,j,k} + \psi_{i,j+1,k} + \psi_{i,j-1,k} + \psi_{i,j,k+1} + \psi_{i,j,k-1}) + (U_{i,j,k} + 6\frac{\hbar^2}{2md^2})\psi_{i,j,k} = E\psi_{i,j,k}. \quad (12)$$

Вычисления естественно проводить с безразмерными величинами

$$u_{i,j,k} = \frac{2md^2}{\hbar^2}U_{i,j,k}, \quad \varepsilon = \frac{2md^2}{\hbar^2}E.$$

Таким образом получили систему из N^3 линейных уравнений вида:

$$-(\psi_{i+1,j,k} + \psi_{i-1,j,k} + \psi_{i,j+1,k} + \psi_{i,j-1,k} + \psi_{i,j,k+1} + \psi_{i,j,k-1}) + (u_{i,j,k} + 6)\psi_{i,j,k} = \varepsilon\psi_{i,j,k}. \quad (13)$$

Если C – матрица размера $N^3 \times N^3$ коэффициентов данной системы линейных уравнений, \mathbf{v} – столбцы значений ψ на сетке, то имеем

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

и исходная задача эквивалентна нахождению собственных значений ε_n и собственных векторов \mathbf{v}_n , соответствующим значениям энергии дискретных уровней и значениям волновой функции на сетке для определенного набора возможных квантовых состояний.

3.2 Свойства матрицы C

Приведем характерный вид матрицы C для простейшей задачи с $N = 3$ для двумерного случая (размер матрицы будет 9×9 , а не 27×27 , на главной диагонали вместо $u + 6$ окажутся $u + 4$). Нулевые элементы не показаны.

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

Легко заметить, что C – симметричная разреженная матрица. Симметричность C подтверждает правильность выбора разностной схемы: согласно теории[1], матрица СЛАУ должна оказаться эрмитовой. Заранее отметим, что симметричность позволяет существенно упростить алгоритм нахождения собственных значений (здесь и далее – СЗ) и векторов. Разреженность матрицы C , то есть относительно малое число ненулевых элементов в ней, наряду с её большими размерами приводит к необходимости хранения такой матрицы в специальном формате.

Существует большое число форматов хранения разреженных матриц [2]:

1. compressed sparse column format (CSC) – матрица рассматривается по столбцам, в массивах хранятся ненулевые значения, соответствующие номера строк, номера строк первого и последнего элемента в столбце;
2. compressed sparse row format (CSR) – то же для строк;
3. coordinate format – хранится массив ненулевых элементов и их координаты;
4. diagonal format – для ленточных матриц, массивы содержат значения на диагоналях с ненулевыми элементами;
5. skyline storage format – контурный формат хранения, сложен для параллельных вычислений.

Из соображений простоты алгоритма и для сохранения возможности рассматривать отдельные столбцы матрицы был выбран формат хранения CSC.

3.3 Процедура нахождения собственных векторов и собственных значений

Спектральным разложением действительной симметричной матрицы $A = [a_{ij}]$ размера $n \times n$ называется представление матрицы A в виде $A = U\Lambda U^T$, где U – действительная ортогональная матрица, $U^T U = U U^T = I_n$ и $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ – действительная диагональная матрица [3]. Числа λ_i являются собственными значениями A , а столбцы \mathbf{u}_i матрицы U – собственными векторами A , $A\mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i, i = 1, \dots, n$.

Число операций для получения спектрального разложения существенно зависит от самой матрицы. Например, для симметричной матрицы $n \times n$ общего вида сложность алгоритма составит примерно $O(n^3)$, а для трехдиагональной матрицы – $O(n^2)$. Поэтому принято поступать следующим образом: сначала приводят данную матрицу A

к трехдиагональному виду T , затем вычисляют спектральное разложение T , обратными преобразованиями получают то же разложение для A . Для разреженных матриц наиболее эффективным является метод Ланцоша, позволяющий построить T_j для определенного числа j собственных значений.

3.3.1 Симметричный процесс Ланцоша

Ниже приведён алгоритм для симметричного процесса Ланцоша для эрмитовой матрицы C размера $n \times n$ и ненулевого стартового вектора $\mathbf{r} \in \mathbb{C}^n$ [3].

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 $j = 1, 2, \dots$ **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

Нетрудно заметить, что векторы Ланцоша (\mathbf{v}_j) удовлетворяют рекуррентным соотношениям:

$$\mathbf{v}_{i+1}\beta_{i+1} = C\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_i\alpha_i - \mathbf{v}_{i-1}\beta_i, \quad i = 1, \dots, j. \quad (14)$$

Положив

$$V_j = (\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2 \quad \dots \quad \mathbf{v}_j), \quad \mathbf{e}_j^T = (0 \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad 1), \quad T_j = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \beta_3 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta_j \\ 0 & \vdots & 0 & \beta_j & \alpha_j \end{pmatrix},$$

уравнение (14) можно переписать как:

$$CV_j = V_jT_j + \beta_{j+1}\mathbf{v}_{j+1}\mathbf{e}_j^T \approx V_jT_j. \quad (15)$$

Тогда j собственных значений $\lambda_i^{(j)}$ матрицы T_j можно приближенно рассматривать как первые j собственных значений матрицы C . Соответствующие им собственные векторы C через собственные векторы T_j приближенно выражаются как

$$\mathbf{x}_i^{(j)} = V_j\mathbf{z}_i^{(j)}, \quad T_j\mathbf{z}_i^{(j)} = \mathbf{z}_i^{(j)}\lambda_i^{(j)}. \quad (16)$$

С помощью симметричного процесса Ланцоша получили трехдиагональную матрицу меньшего размера, собственные значения которой такие же, как у данной матрицы. Число собственных значений, которые можно найти таким образом, соответствует числу итераций, то есть выбирается пользователем.

3.3.2 Методы спектрального разложения для трехдиагональных матриц

Перечислим основные современные методы спектрального разложения для симметричных матриц [3]:

1. QR-алгоритм – использует многочисленные QR-разложения;
2. Divide and conquer method ("Разделяй и властвуй") – наиболее быстрый метод для последовательных программ;
3. Метод бисекции и обратных итераций – для нахождения k собственных значений требуется $O(kn)$ операций;
4. Метод Якоби – не требует тридиагонализации, достаточно медленный;
5. Метод Ланцоша – вычисление части собственных значений, описан ранее.

Из них эффективно распараллеливанию поддаются метод бисекции и метод Якоби. Для написания программы был выбран метод бисекции как более быстрый.

3.3.3 Метод бисекции

Пусть $\text{Inertia}(A) = (\nu, \zeta, \pi)$ – набор чисел, соответствующих числу положительных, отрицательных и нулевых собственных значений матрицы A . Предположим, что матрица X - невырожденная. Тогда согласно закону инерции квадратичной формы, $\text{Inertia}(A) = \text{Inertia}(X^T A X)$ [4].

Если есть гауссово разложение $A - zI = LDL^T$, где L - невырожденная, D - диагональные матрицы, то $\text{Inertia}(A - zI) = \text{Inertia}(D)$. Для матрицы D число диагональных элементов больших, меньших или равных 0 и есть $\text{Inertia}(D)$. То есть, например, число отрицательных элементов на главной диагонали D равно числу отрицательных собственных значений матрицы $A - zI$ или числу собственных значений матрицы A , меньших z .

Пусть $z_1 < z_2$, найдены $\text{Inertia}(A - z_1 I)$, $\text{Inertia}(A - z_2 I)$, $\text{Negcount}(A, z)$ - число СЗ A , меньших z . Тогда число СЗ в интервале $[z_1, z_2)$ равно

$$\text{Negcount}(A, z_2) - \text{Negcount}(A, z_1).$$

Разбивая вещественную ось на отрезки конечной длины, обрабатывая их параллельно и уменьшая длину отрезков, можем определить СЗ. Алгоритм метода бисекции на интервале $[a, b)$ приведен ниже.

Диагональные элементы матрицы D в таком разложении можно найти по рекуррентным формулам (предполагается, что A - трехдиагональная матрица):

$$d_i = (a_i - z) - \frac{b_{i-1}^2}{d_{i-1}}. \quad (17)$$

Можно показать, что несмотря на отсутствие выбора главного элемента, такой способ подсчёта оказывается очень устойчивым.

Для нахождения собственных векторов A можно воспользоваться методом обратных итераций.

3.4 Использование технологий параллельного программирования

В программе использовалась технология OpenMP для распараллеливания наиболее ресурсозатратного участка программы, реализующего метод бисекции и последующее нахождение собственных векторов методом обратных итераций. Поскольку используемый

Algorithm 2: Метод бисекции нахождения СЗ A на интервале $[a, b)$ с точностью tol [4]

```

 $n_a = \text{Negcount}(A, a)$ 
 $n_b = \text{Negcount}(A, b)$ 
if  $n_a = n_b$  then break;
                                                    /* на  $[a, b)$  нет СЗ */

Поместить  $[a, n_a, b, n_b]$  в Список задач
/* Список задач содержит интервалы  $[a, b)$  с СЗ с номерами от  $n - n_a + 1$  до
 $n - n_b$ , которые будут последовательно разбиты пополам, пока не окажутся
короче  $tol$ .
                                                    */
while Список задач не пуст do
    Убрать  $[low, n_{low}, up, n_{up}]$  из Списка
    if  $up - low < tol$  then
        | На  $[low, up)$   $n_{up} - n_{low}$  СЗ
    else
         $mid = (low + up)/2$ 
         $n_{mid} = \text{Negcount}(A, mid)$ 
        if  $n_{mid} > n_{low}$  then
            | Поместить  $[low, n_{low}, mid, n_{mid}]$  в СПИСОК
        end
        if  $n_{up} > n_{mid}$  then
            | Поместить  $[mid, n_{mid}, up, n_{up}]$  в СПИСОК
        end
    end
end

```

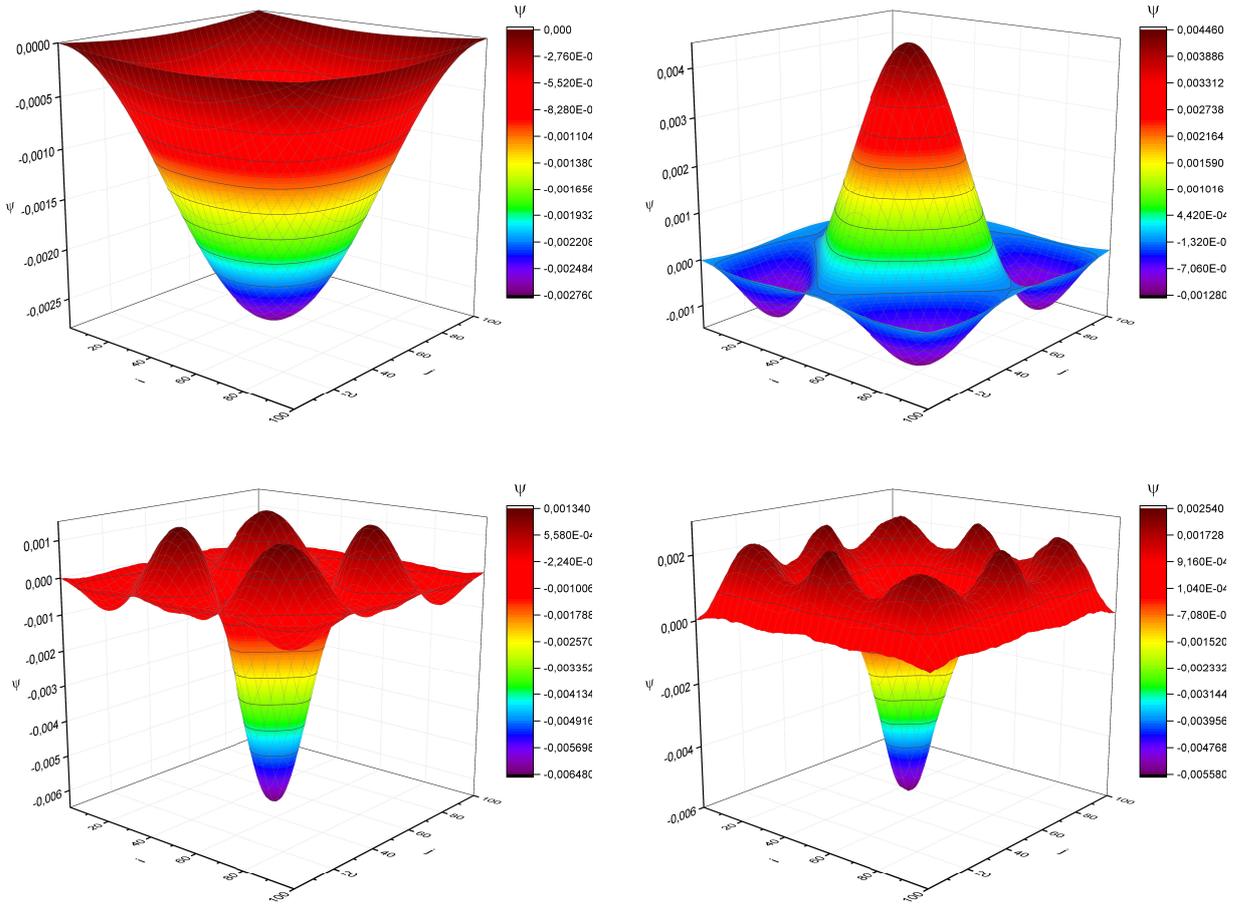


Рис. 1: Графики зависимости волновой функции от координат сетки i, j при $N = 100, U(x, y, z) = 0$

алгоритм выполняет поиск СЗ на заданном интервале $[a, b)$, распределение задач между процессорами можно организовать очень просто: интервал $[l, r)$, на котором будет вестись глобальный поиск СЗ, разбивается на непересекающиеся подинтервалы $[a_i, b_i)$. Директива `#pragma omp for` с опцией `schedule(dynamic, chunk)` эффективно распределяет эти подинтервалы между процессорами. Таким образом, вычисления ведутся независимо, а синхронизация требуется только в момент записи результатов расчёта.

4 Результаты

4.1 Яма с нулевым потенциалом

Для задачи с нулевым потенциалом аналитическое решение было получено ранее (4). Поскольку решение уравнения Шрёдингера (13) на сетке $N \times N \times N$ даёт вектор из N^3 чисел, для наглядного представления результатов будем строить график волновой функции в зависимости от координат узлов i, j для фиксированного значения третьей переменной k . Для больших значений энергии E_n на ребро рассматриваемой области будет укладываться большое число полупериодов периодической функции ψ , что усложнит восприятие результата. Поэтому будем строить графики волновой функции начиная с наименьших значений E_n . Видно (рис. 1 и 2), что полученные волновые функции соответствуют теоретическим (см. (4)).

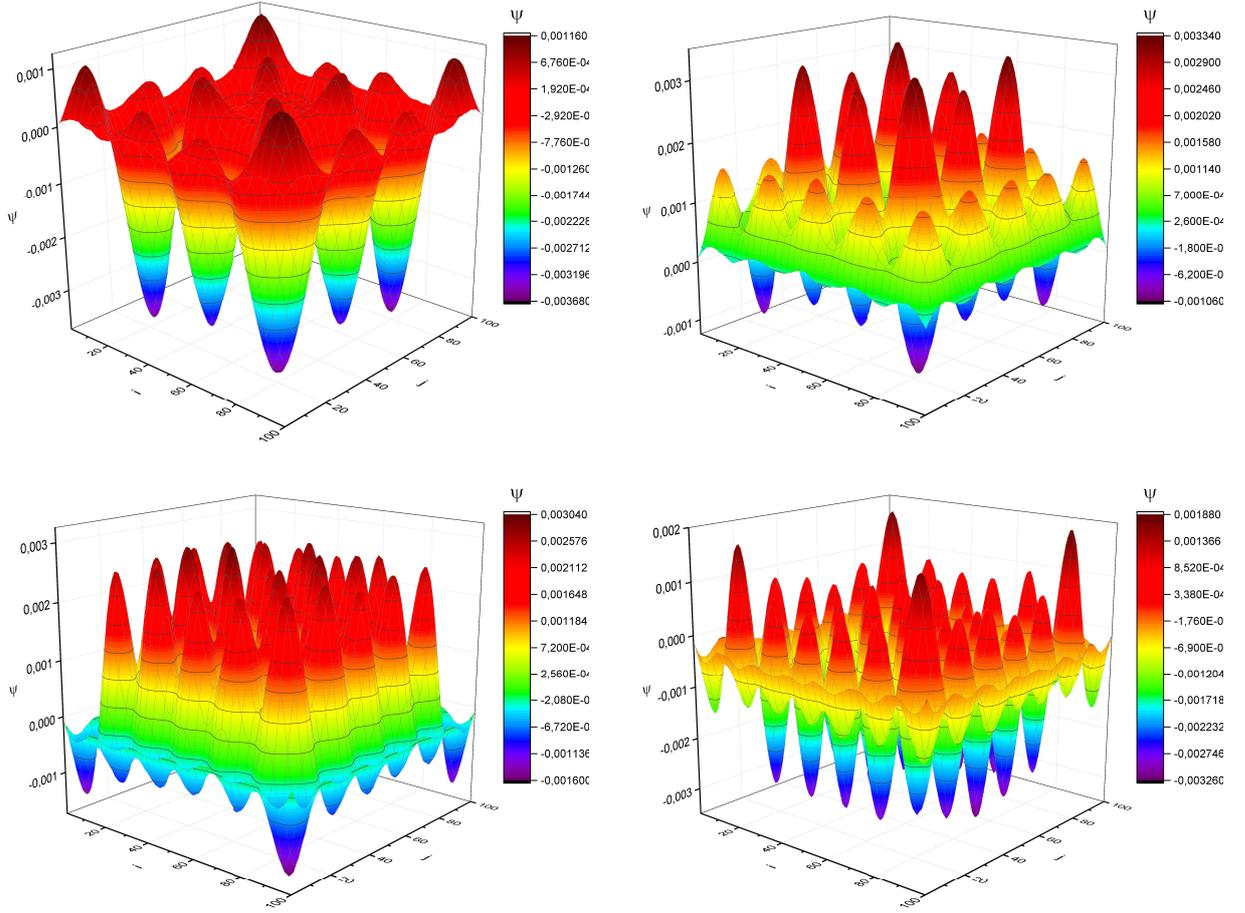


Рис. 2: Графики зависимости волновой функции от координат сетки i, j при $N = 100, U(x, y, z) = 0$

4.2 Нетривиальная задача

Рассмотрим нетривиальную задачу с потенциалом $U(x, y, z) = C(x + y + z)$, $C = \text{const}$. Аналитическое решение для сравнения и проверки неизвестно, но можно ожидать симметрию получающейся волновой функции относительно плоскостей $x + y + z = \text{const}$. Приведём полученные результаты для различных значений $\lambda^{(j)}$.

Как видно из рисунка 3, имеется постоянство волновой функции на прямых $x + y = \text{const}$ (третья координата z – фиксирована). Интересно проследить эволюцию решения: при увеличении λ "возмущенная" область распространяется всё дальше от начала координат, вместе с ней смещается и пик наибольшей амплитуды.

4.3 Гармонический осциллятор

Интересный случай представляет собой потенциал гармонического осциллятора $U(x, y, z) = C(x^2 + y^2 + z^2)$. Для него в одномерном случае существует точное решение, описываемое волновыми функциями [5]:

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

где $H_n(x)$ – полиномы Эрмита,

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2},$$

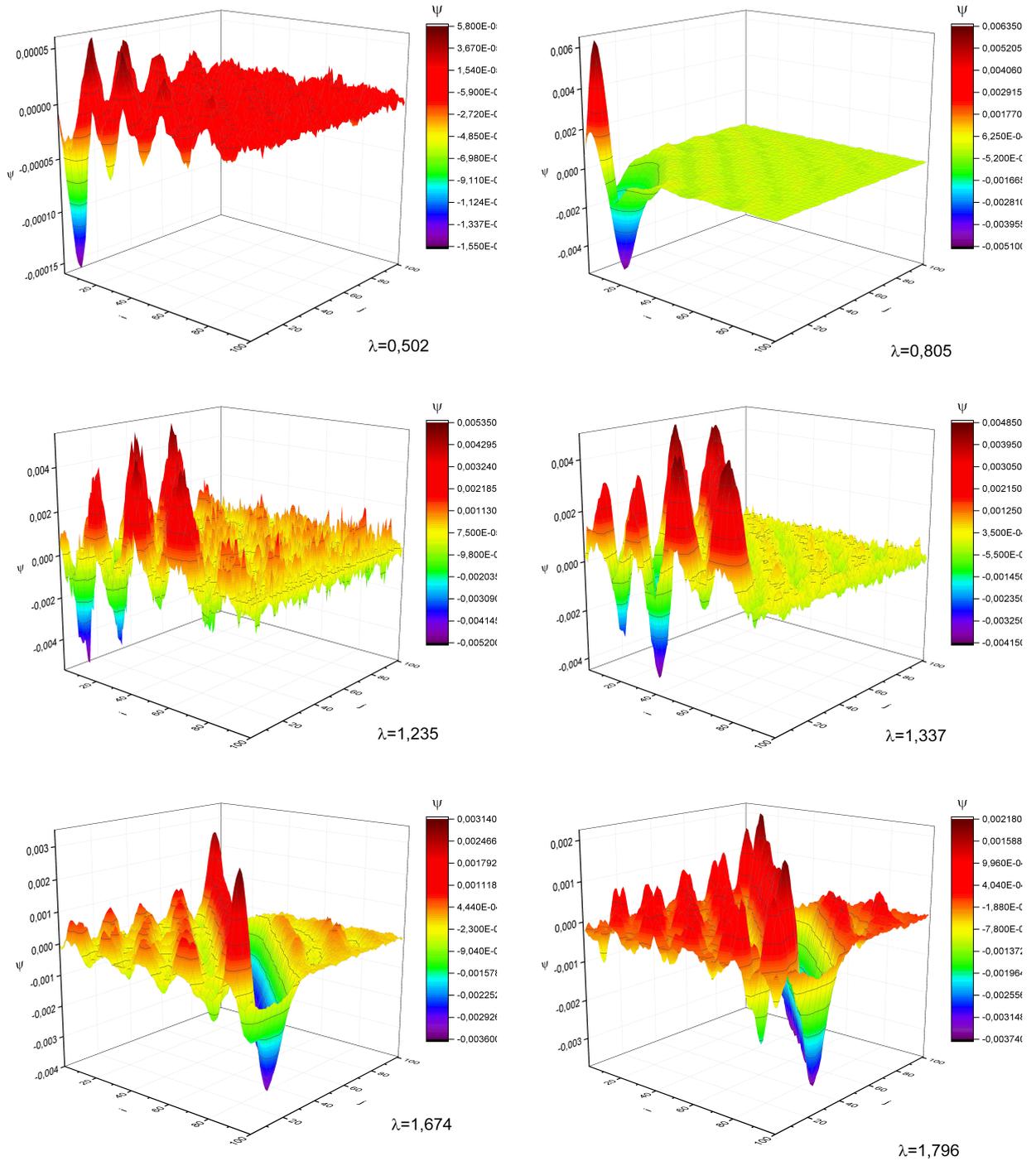


Рис. 3: Графики зависимости волновой функции от координат сетки i, j при $N = 100$, $U(x, y, z) = C(x + y + z)$, $C = \text{const}$

а уровни энергии эквидистантны:

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

Пример физической системы, для которой полезно знать решение уравнения Шрёдингера в этом случае – двухатомная молекула с колебательной степенью свободы (H_2, HCl, CO, N_2, O_2).

Результаты расчётов в зависимости от $\lambda^{(j)}$ приведены на рисунке 4. В зависимости от величины $\lambda^{(j)}$ картина немного меняется: с увеличением λ расширяется область

возмущений, появляются дополнительные максимумы. Это соответствует виду аналитического решения. Также можно отметить, что вычисленные волновые функции симметричны относительно вертикальной оси в точке $(0, 0)$ – это соответствует симметрии потенциальной энергии относительно поворотов осей координат.

Теоретический спектр энергии гармонического осциллятора эквидистантен. Для результатов в нашей задаче (см. рис. 5) это справедливо при малых значениях энергии: в дальнейшем сказывается влияние на решение стенок ямы.

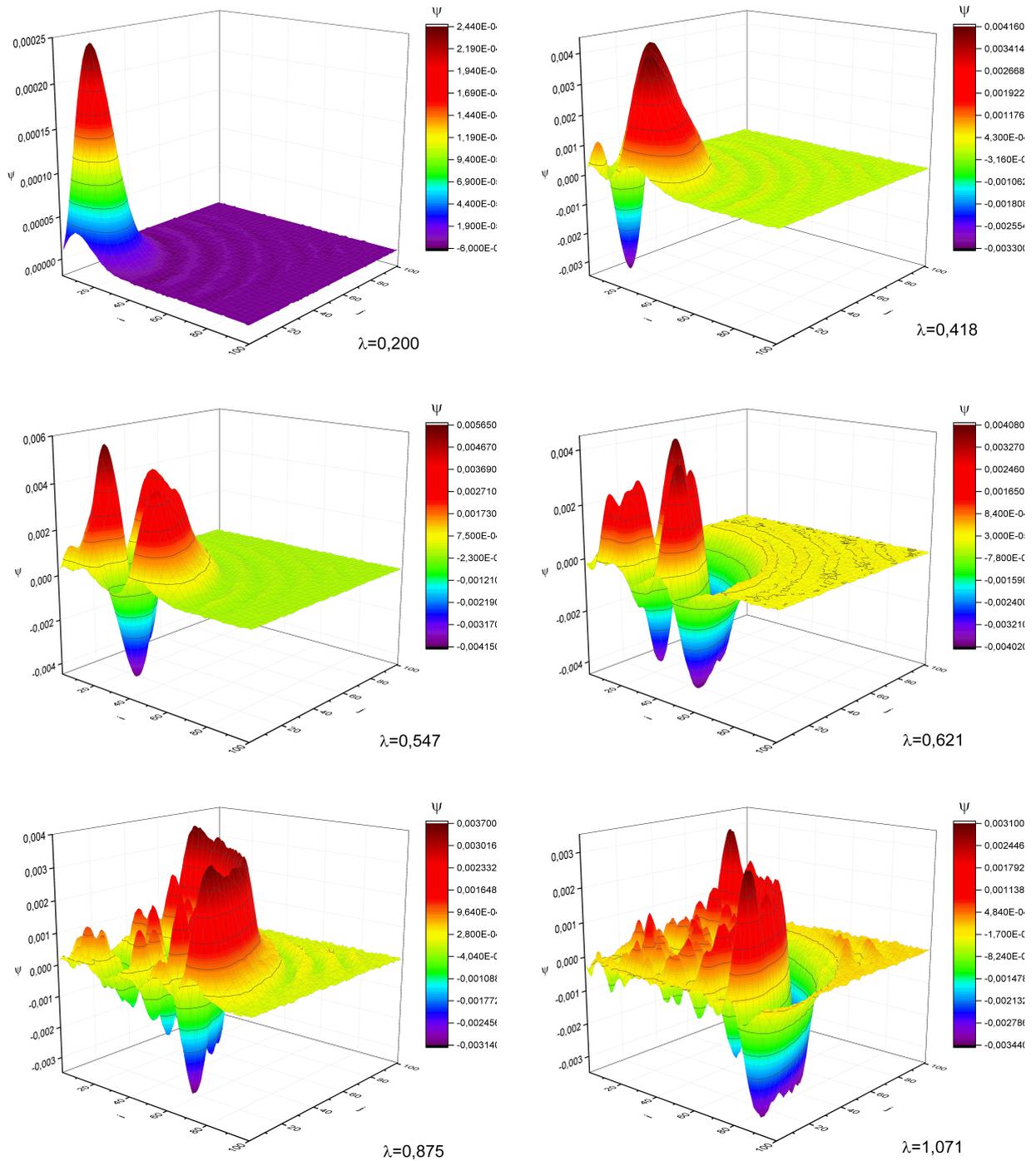


Рис. 4: Графики зависимости волновой функции от координат сетки i, j при $N = 100$, $U(x, y, z) = C(x^2 + y^2 + z^2)$, $C = \text{const}$

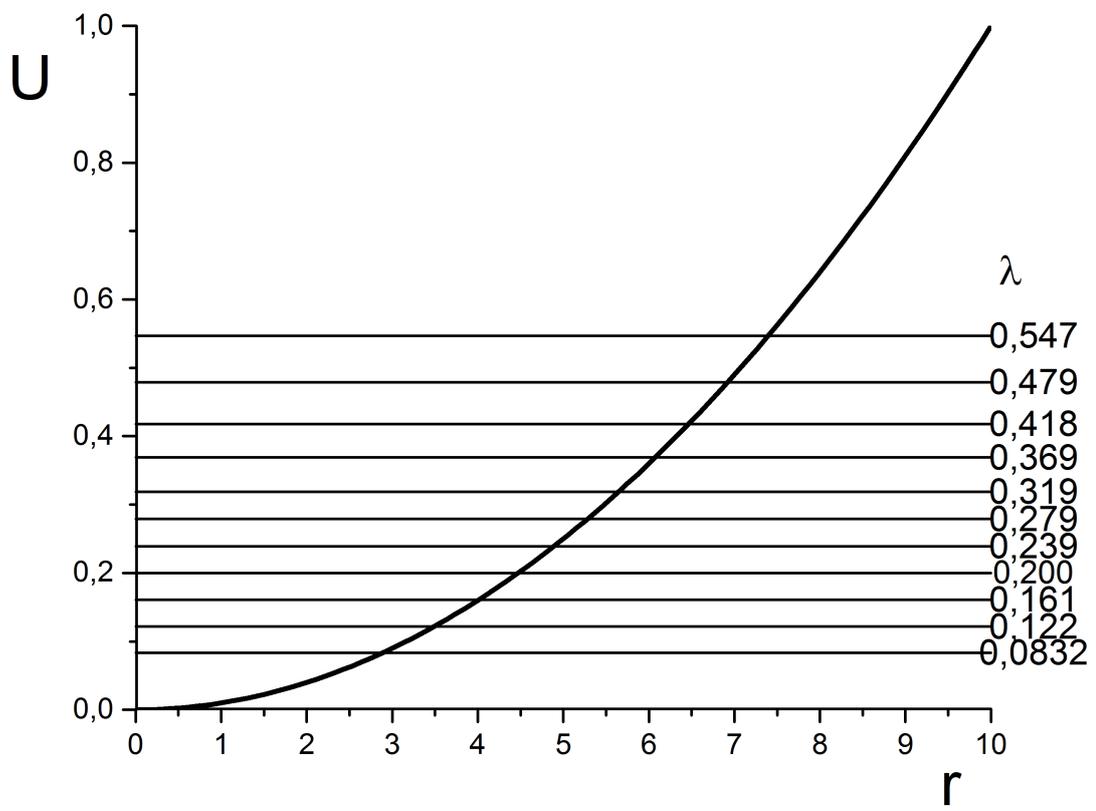


Рис. 5: Проверка эквидистантности найденных уровней гармонического осциллятора

4.4 Пробная частица в поле одноимённого заряда

Найдём решение задачи о движении пробной частицы в кулоновском поле одноименного заряда: $U(r) = \frac{C}{r}$, где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Некоторые результаты представлены на рисунке 6. Максимум плотности вероятности соответствует наибольшему расстоянию между зарядами.

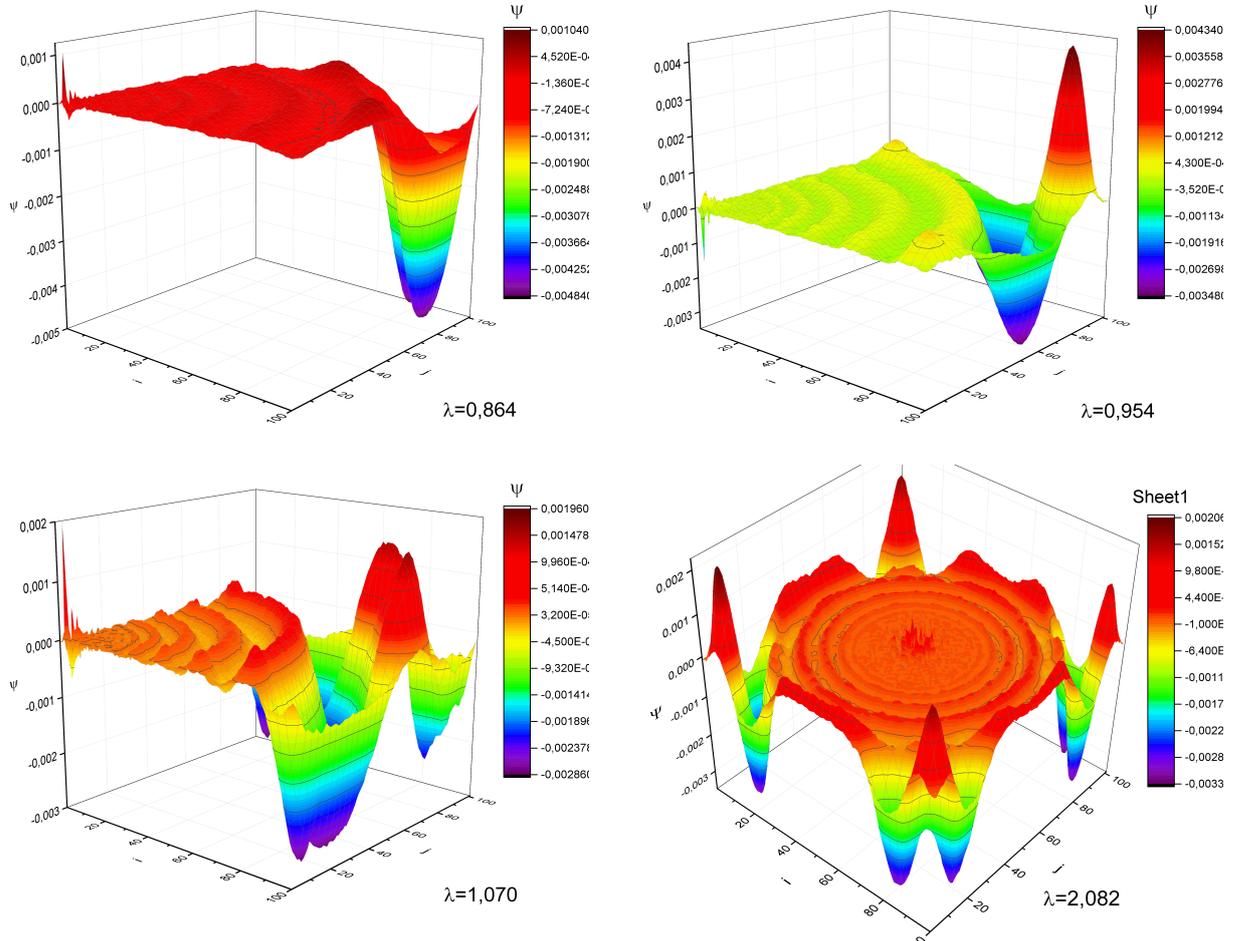


Рис. 6: Графики зависимости волновой функции от координат сетки i, j при $N = 100$, $U(x, y, z) = C/r$, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

4.5 Пробная частица в поле двух одноимённых зарядов

Пусть теперь частица движется в поле двух одноимённых зарядов. Потенциальная энергия $U(x, y, z) = C/r_1 + C/r_2$, $r_{1,2} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Максимум плотности вероятности соответствует расположению частицы на наибольшем расстоянии от каждого из зарядов.

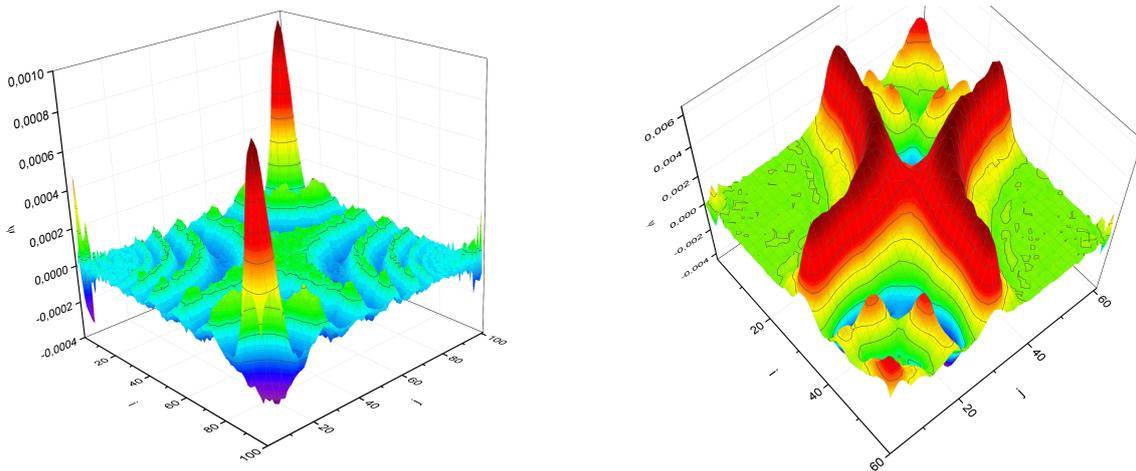


Рис. 7: Графики зависимости волновой функции от координат сетки i, j при $N = 100$, $U(x, y, z) = C/r_1 + C/r_2$, $r_{1,2} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

5 Результаты оптимизации

На рисунке 8 представлена зависимость ускорения программы от числа процессоров, использовавшихся для её запуска на суперкомпьютере "Ломоносов". Запуски программы с временным счетчиком позволили определить время выполнения последовательной и параллельной частей – 10 и 90% времени соответственно для минимального числа работающих процессоров. Наблюдаемое ускорение не слишком велико, что обусловлено долей последовательной части программы. Решаемая задача достаточно сложна, поэтому её решение было разбито на несколько независимых частей (см. раздел Численное моделирование). Основываясь на достижениях современной линейной алгебры, для решения задачи были выбраны методы, позволяющие максимально уменьшить время работы программы. Время работы программы с максимально возможной нагрузкой – всего 490 с, что является сравнительно малым для задач, требующих большой объём вычислений. Таким образом, оптимизация была заложена в алгоритм на этапе планирования последовательной части.

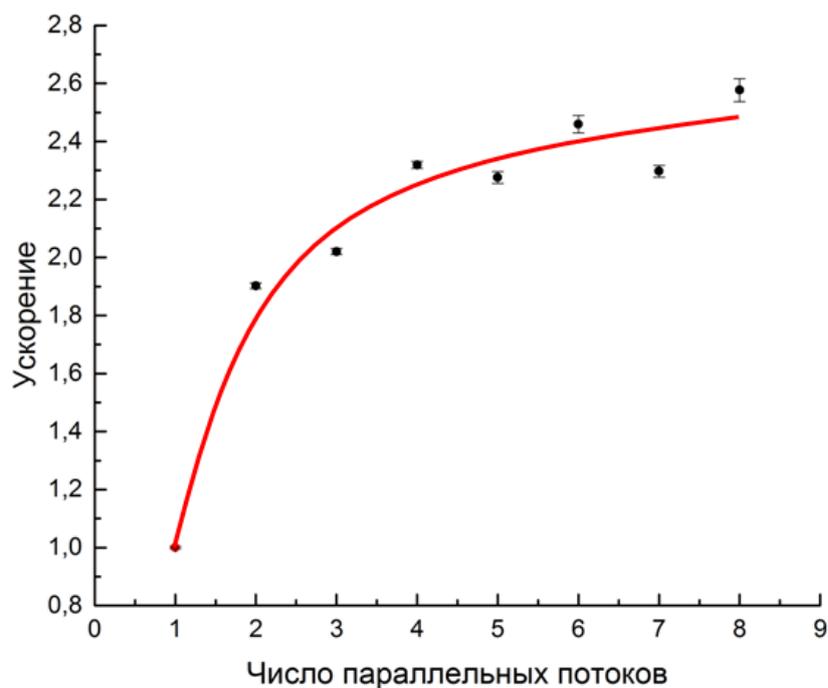


Рис. 8: График зависимости наблюдаемого ускорения от числа используемых потоков

6 Выводы

В результате выполнения работы была написана программа, позволяющая за приемлемое время численно решать уравнение Шрёдингера для любого вида потенциала. В программе использованы несколько современных численных методов нахождения собственных чисел и собственных функций, технология параллельного программирования OpenMP. Представлены результаты, соответствующие ожиданиям.

Список литературы

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука, 1989.
- [2] Developer Reference for Intel®Math Kernel Library 2017 - C. Appendix A. Sparse Matrix Storage Formats.
software.intel.com/en-us/mkl-developer-reference-c
- [3] Hogben, L. Handbook of linear algebra. Taylor & Francis Group, 2007.
- [4] Dammal J. W. Applied Numerical Linear Algebra. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
- [5] Фларри Р. Квантовая химия. – М.: Мир, 1985.