

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»**

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ В
КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ: ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЙ И ПАРАЛ-
ЛЕЛЬНЫЙ ПОДХОДЫ**

Практикум

Рекомендовано методической комиссией физического факультета для студентов и аспирантов ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки 03.03.02 «Физика» и 11.03.04 «Электроника и нанoeлектроника»

Нижегород
2017 год

УКД 537.3
ББК 22.3
С-43

С-43 ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ: ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЙ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ ПОДХОДЫ: Составители: Козулин А.С., Азарова Е.С., Сатанин А.М. Практикум. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2017. – 35 с.

Рецензент: к.ф.м.н., доцент **Н.В. Сомов**

Пособие посвящено изложению метода численного решения одномерного уравнения Шредингера. В первой части дана постановка квантово-механической задачи рассеяния в одномерном случае и элементарное введение в теорию S -матрицы. Показано, как внешняя задача может быть сведена к решению внутренней краевой задачи с несамосопряженными граничными условиями. В качестве примера приводится аналитическое решение задачи о прохождении электрона над прямоугольной потенциальной ямой. Первая часть завершается разработкой последовательного алгоритма численного решения одномерной задачи рассеяния и демонстрацией результатов численных расчетов.

Во второй части пособия разработан параллельный алгоритм для вычисления коэффициентов прохождения и отражения в одномерной задаче рассеяния, который может быть адаптирован и для решения многомерных задач. В этом же разделе производится оценка коэффициента ускорения численного процесса, реализованного в пакете программирования *Mathematica*, и указываются возможные способы его повышения.

В качестве дополнительного материала пособие содержит три приложения, в которых приводится вывод дискретного уравнения Шредингера, обсуждается переход к безразмерным переменным в численных расчетах и даются элементы параллельного программирования в пакете *Mathematica*.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов физического факультета ННГУ.

Ответственный за выпуск:
председатель методической комиссии
физического факультета ННГУ, к.ф.-м.н., доцент **Сдобняков В.В.**

ББК 22.3

© А.С. Козулин, Е.С. Азарова, А.М. Сатанин, 2017
© Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского, 2017

Содержание

1.	Задача рассеяния в квантовой механике. Последовательная версия	4
1.1.	Задача рассеяния в одномерном случае	
1.2.	Матрица рассеяния	6
1.3.	Внутренняя задача	8
1.4.	Пример аналитического решения внутренней задачи	9
1.5.	Численное решение внутренней задачи	11
1.6.	Примеры численных расчетов с использованием последовательного алгоритма	14
2.	Задача рассеяния в квантовой механике. Параллельная версия	17
2.1.	Параллельный алгоритм решения одномерной задачи рассеяния	
	Разбиение на блоки	
	Прогонка в отдельном блоке	18
	Вычисление волновой функции в граничных узлах блоков	21
2.2.	Примеры численных расчетов с использованием параллельного алгоритма	25
	Заключение	27
Приложение 1.	Дискретизация уравнения Шредингера	28
Приложение 2.	Переход к безразмерным переменным в уравнении Шредингера	29
Приложение 3	Элементы параллельного программирования в пакете <i>Mathematica</i>	31
	Литература	35

Часть 1. Задача рассеяния в квантовой механике. Последовательная версия

В экспериментах по рассеянию испущенные источниками частицы налетают на мишень, а затем, после взаимодействия с мишенью (рассеивателем), детектируются приборами, расположенными на больших расстояниях от рассеивателя. Для описания процессов рассеяния необходимо уметь решать уравнение Шредингера с соответствующими граничными условиями. Первая часть данного пособия начинается с постановки квантово-механической задачи рассеяния в одномерном случае. После элементарного введения в теорию S -матрицы (матрицы рассеяния) предлагается способ сведения внешней задачи к внутренней краевой задаче с несамосопряженными граничными условиями. В качестве примера рассматривается задача о прохождении электрона над прямоугольной потенциальной ямой. Первая часть завершается разработкой последовательного алгоритма численного решения одномерной задачи рассеяния и демонстрацией результатов численных расчетов.

1.1. Задача рассеяния в одномерном случае

Рассмотрим одномерное движение свободной частицы с гамильтонианом $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$. Оператор импульса $\hat{p}_x = -i\hbar d/dx$ коммутирует с \hat{H}_0 , поэтому эти операторы имеют общий базис $\psi(x) = A^\pm \exp(\pm ipx/\hbar)$. Таким образом, состояния рассеяния характеризуются проекцией импульса.

Пусть теперь на частицу действует потенциал $V(x)$, отличный от нуля в области с характерной длиной L , причем $V(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ (как изображено на рис 1.1). Стационарное уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x), \quad (1.1)$$

решением которого является волновая функция $\psi(x)$, удобно переписать в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0. \quad (1.2)$$

Если считать, что источник частиц находится слева от рассеивателя (области с ненулевым потенциалом) и достаточно удален от него ($x \rightarrow -\infty$), то решение в области $x < 0$ может быть записано в виде

$$\psi(x) = A_i^+ \exp(ikx) + A_i^- \exp(-ikx), \quad (1.3)$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ - волновой вектор ($E > 0$). Как видно, решение (1.3) есть суперпозиция двух частных решений, соответствующих падающей и отраженной волнам.

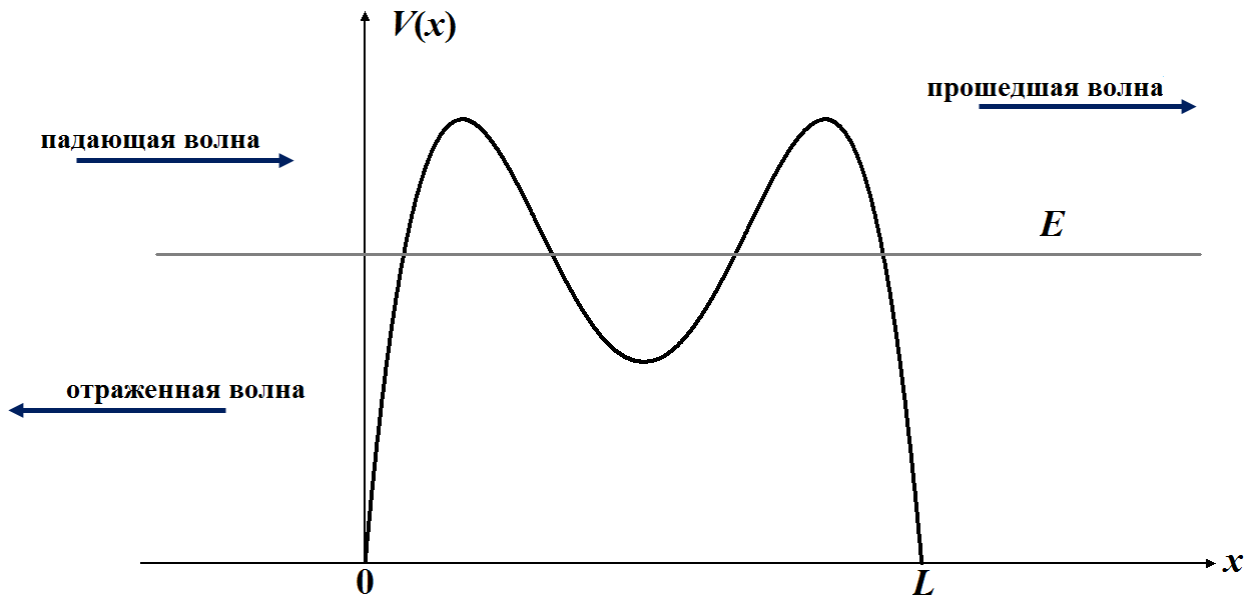


Рисунок 1.1. Рассеяние волн на одномерном потенциале $V(x)$: слева имеется источник и отраженные волны, справа – только прошедшие волны

Аналогично, для области $x > 0$ (справа от рассеивателя) имеем

$$\psi(x) = A_r^+ \exp(ikx) + A_r^- \exp(-ikx). \quad (1.4)$$

Однако если источник частиц расположен слева, то при $x \rightarrow +\infty$ есть только уходящая волна ($A_r^- = 0$), и поэтому $\psi(x) = A_r^+ \exp(ikx)$.

Участвующие в процессе волны можно характеризовать потоками вероятностей. Для этого введем потоки падающих j_0 , отраженных j_R и прошедших j_T частиц. Квантово-

механическое выражение для потока вероятностей [1, 2] позволяет записать потоки слева и справа от рассеивателя:

$$j_0 = \frac{\hbar k}{m} |A_l^+|^2, \quad j_R = \frac{\hbar k}{m} |A_l^-|^2, \quad j_T = \frac{\hbar k}{m} |A_r^+|^2. \quad (1.5)$$

Счетчик частиц определяет относительные величины, которые можно характеризовать коэффициентами прохождения (прозрачностью) $T(E)$ и отражения $R(E)$:

$$T(E) = \frac{j_T}{j_0} = \frac{|A_r^+|^2}{|A_l^+|^2}, \quad R(E) = \frac{j_R}{j_0} = \frac{|A_l^-|^2}{|A_l^+|^2}. \quad (1.6)$$

Подобные соотношения нетрудно получить и для случая, когда источник частиц находится справа от рассеивателя.

1.2. Матрица рассеяния

Процессы столкновения частиц удобно описывать матрицей рассеяния (кратко S -матрица, от *англ.* scattering – рассеяние), которая содержит всю информацию о свойствах рассеивателя [1, 3]. Данный параграф представляет собой элементарное введение в теорию S -матрицы. В нем излагается способ вычисления элементов матрицы рассеяния и обсуждается информация, которую они содержат.

Как видно из (1.6), для вычисления коэффициентов прохождения и отражения достаточно знать только отношения амплитуд. С другой стороны, поскольку уравнение Шредингера линейно, между амплитудами волн должна существовать линейная связь, которую удобно записать в виде

$$\begin{pmatrix} A_r^+ \\ A_l^- \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_r^- \\ A_l^+ \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

где введена матрица S , связывающая амплитуды падающих и отраженных волн (см. рис. 1.2). Элементами матрицы рассеяния являются амплитудные коэффициенты от-

ражения r , r' и прохождения t , t' . Из общих соображений (сохранение потока вероятности и симметрия относительно обращения времени) следует, что $S^+ = S^{-1}$, $S = S^T$ [3, 4].

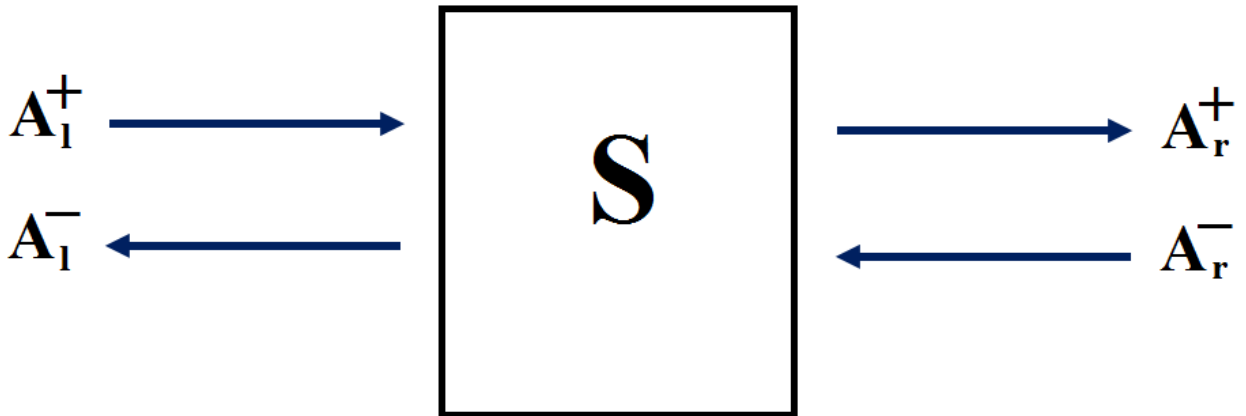


Рисунок 1.2. Схема рассеяния. Матрица рассеяния – «черный ящик», который содержит всю информацию о внутренних процессах рассеяния

Амплитудные коэффициенты отражения и прохождения, рассматриваемые как функции энергии E , содержат богатую информацию о системе. Во-первых, амплитуды t и r определяют коэффициенты прохождения и отражения

$$T(E) = |t|^2, \quad R(E) = |r|^2. \quad (1.8)$$

Во-вторых, полюсы амплитуд рассеяния в комплексной плоскости E соответствуют дискретным уровням или резонансам [4].

Особый интерес при изучении рассеяния частиц вызывают резонансы. Известно, что вероятность прохождения электрона через высокий барьер (высота барьера больше энергии электрона) мала. При этом она монотонно зависит от энергии. Однако прозрачность может возрасти и даже стать полной, если внутри барьера имеются квазисвязанные состояния [4]. В этом случае возможна конструктивная интерференция волновой функции падающего электрона с волновой функцией квазисвязанного состояния и, как следствие, появляется резонанс прохождения. Вблизи него прозрачность как функция энергии имеет лоренцову форму, характеризующуюся двумя параметрами: энергией квазисвязанного состояния и шириной резонанса Γ . Квазисвязанное состояние имеет общую природу с истинно связанным состоянием в потенциальном поле [4], поскольку на временах меньших $\sim \hbar/\Gamma$ волновая функция в барьере подобна локализованному состоянию. Очевидно также, что если в потенциальном поле имеется много квазисвязанных состояний, то им будет соответствовать серия резонансов в прозрачности барьера. Виртуальные уровни отталкива-

ются при изменениях параметров барьера; соответственно, расталкиваются и резонансы. Иными словами, происходит рассеяние резонансов вполне аналогичное рассеянию частиц. Моделирование резонансного рассеяния в квантовой механике представляет особый интерес.

1.3. Внутренняя задача

Пусть потенциал $V(x)$ отличен от нуля в области $x \in (0, L)$. Будем полагать начальный поток нормированным на единицу, т.е. $A_1^+ = 1$. Тогда с учетом выражений (1.6) и (1.8) волновая функция (1.3) в области $x < 0$ может быть представлена в виде:

$$\psi(x) = \exp(ikx) + r \exp(-ikx). \quad (1.9)$$

При $x > L$ волновую функцию удобно записать как

$$\psi(x) = t \exp(ik(x - L)). \quad (1.10)$$

Появившийся здесь множитель $\exp(-ikL)$, позволяет более компактно записать финальное выражение для амплитуды t (см. ниже). Его появление оправдано тем, что волновая функция определена с точностью до постоянного фазового множителя, модуль которого равен единице.

Волновая функция во внутренней области $x \in [0, L]$ - решение уравнения (1.2). Полагая потенциал $V(x)$ произвольным, рассмотрим алгоритм численного решения (1.2) с соответствующими граничными условиями. Для этого сформулируем внутреннюю задачу, т.е. выразим характеристики рассеяния (в данном случае r и t) через волновую функцию, заданную во внутренней области $x \in [0, L]$.

Из условий непрерывности волновой функции и ее производной в точке $x = 0$ следует

$$\begin{cases} \psi(0) = 1 + r \\ \psi'(0) = ik(1 - r) \end{cases} \quad (1.11)$$

Исключая r из последней системы, найдем

$$\psi'(0) + ik\psi(0) = 2ik. \quad (1.12)$$

Потребуем непрерывности волновой функции и ее производной в точке $x = L$ и получим:

$$\begin{cases} \psi(L) = t \\ \psi'(L) = ikt \end{cases} \quad (1.13)$$

Далее, исключив из них t , запишем

$$\psi'(L) - ik\psi(L) = 0. \quad (1.14)$$

Таким образом, для нахождения внутренних характеристик рассеяния r и t (а значит и коэффициентов отражения R и прохождения T) необходимо во внутренней области решить уравнение (1.3) с граничными условиями (1.12) и (1.14). Если внутренняя задача решена, то, используя (1.9) и (1.10), можно найти

$$r = \psi(0) - 1, \quad t = \psi(L). \quad (1.15)$$

1.4. Пример аналитического решения внутренней задачи

Применим изложенный метод для решения задачи рассеяния в поле

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ -|V_0|, & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x > L \end{cases} \quad (1.16)$$

В дальнейшем полученное решение будет служить «тестом» для написанных программ.

Во внутренней области необходимо решить уравнение

$$\psi'' + q^2\psi = 0, \quad (1.17)$$

где $q = \sqrt{2m(E + |V_0|)}/\hbar$. Его решение записывается как

$$\psi(x) = a \exp(iqx) + b \exp(-iqx). \quad (1.18)$$

Постоянные a и b определяются из граничных условий (1.12) и (1.14), приводящих к системе уравнений:

$$\begin{cases} (k+q)a + (k-q)b = 2k \\ (k-q)\exp(iqL)a + (k+q)\exp(-iqL)b = 0 \end{cases}, \quad (1.19)$$

где $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Решение системы (1.19) относительно a и b позволяет вычислить амплитуду прохождения $t = \psi(L) = a \exp(iqL) + b \exp(-iqL)$ и коэффициент прозрачности $T = |t|^2$:

$$t = \frac{2kq \exp(-ikL)}{2kq \cos(qL) - i(k^2 + q^2) \sin(qL)}; \quad T(E) = \frac{4E(E + |V_0|)}{4E(E + |V_0|) + V_0^2 \sin^2\left(L\sqrt{2m(E + |V_0|)}/\hbar\right)}. \quad (1.20)$$

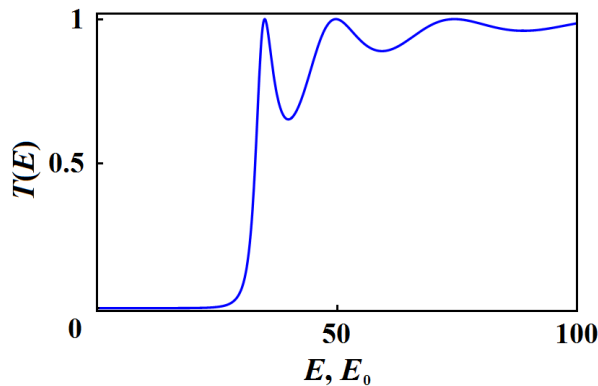


Рисунок 1.3. Зависимость коэффициента прозрачности T от энергии частицы при прохождении над прямоугольной потенциальной ямой (1.16). В данном случае глубина потенциальной ямы $|V_0| = 30E_0$, а в качестве единицы энергии используется $E_0 = \hbar^2/mL^2$ (здесь L – ширина ямы)

На рис. 1.3 представлена зависимость (1.20) коэффициента прохождения T от энергии E . В данной задаче резонансы на зависимости $T(E)$ обусловлены конструктивной интерференцией волн, возникающих при отражении от потенциальной ямы (см. [1, 4]). Для интерпретации резонансной картины прозрачности удобно привлечь аналогию с оптикой и схемой Фабри-Перо [5].

1.5. Численное решение внутренней задачи

В параграфе 1.3 было показано, что для нахождения внутренних характеристик рассеяния r и t (а значит и коэффициентов отражения R и прохождения T) необходимо решить уравнение Шредингера с граничными условиями (1.12) и (1.14) во внутренней области. В данном параграфе будет показано, как это можно сделать численно для произвольного потенциала $V(x)$.

Для численного решения уравнение Шредингера во внутренней области $x \in [0, L]$ разобьем ее на N одинаковых отрезков длиной Δ , концы которых образуют сетку, состоящую из $N+1$ узлов с координатами $x_j = j\Delta$, $j = \overline{0, N}$ (рис. 1.4). Перейдем от непрерывного уравнения Шредингера (1.2) к его дискретному аналогу (см. приложение 1)

$$\psi_{j+1} + u_j \psi_j + \psi_{j-1} = 0, \quad j = \overline{1, N-1}, \quad (1.21)$$

где $u_j = -2 + 2m\Delta^2(E - V_j)/\hbar^2$, $V_j \equiv V(x_j)$. Очевидно, что такая аппроксимация будет справедлива, когда шаг сетки Δ мал по сравнению с характерным масштабом изменения волновой функции.

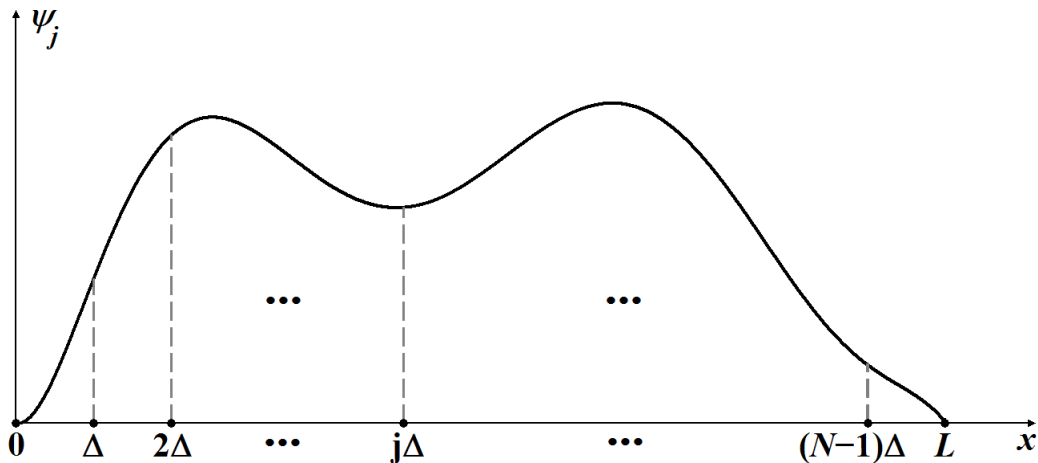


Рисунок 1.4. Волновая функция на дискретной сетке во внутренней области $x \in [0, L]$. Здесь $N+1$ и $\Delta = L/N$ – число узлов и шаг сетки соответственно

Ввиду того, что разностное уравнение (1.21) - аппроксимация второго порядка по Δ уравнения Шредингера (1.3), для корректного решения внутренней задачи дискретные аналоги граничных условий (1.12) и (1.14) должны иметь тот же порядок малости. Для получения «правильных» граничных условий будем действовать следующим образом. Вве-

дем «фиктивный» узел x_{-1} и аппроксимируем производную $\psi'(0)$ в левом конце разностью $(\psi_1 - \psi_{-1})/2\Delta$, имеющей второй порядок точности по Δ (см. [6]), т.е. запишем

$$\psi'(0) \approx \frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2\Delta}. \quad (1.22)$$

Полагая в (1.21) $j=0$, найдем $\psi_{-1} = -(\psi_1 + u_0\psi_0)$, откуда $\psi'(0) \approx (\psi_1 + 0.5u_0\psi_0)/\Delta$. Подстановка в (1.12) последнего выражения приводит к следующему граничному условию на левом конце сетки:

$$\psi_1 + \left(\frac{u_0}{2} + ik\Delta\right)\psi_0 = 2ik\Delta. \quad (1.23)$$

Точно так же для получения второго граничного условия введем «фиктивный» узел x_{N+1} и аппроксимируем производную на правом конце сетке как $(\psi_{N+1} - \psi_{N-1})/2\Delta$. Из (1.21) при $j=N$ найдем $\psi_{N+1} = -(\psi_{N-1} + u_N\psi_N)$, что приводит к $\psi'(L) \approx -(\psi_{N-1} + 0.5u_N\psi_N)/\Delta$. С учетом последнего выражение (1.14) позволяет получить граничное условие на правом конце сетки:

$$\psi_{N-1} + \left(\frac{u_N}{2} + ik\Delta\right)\psi_N = 0. \quad (1.24)$$

Таким образом, мы приходим к системе разностных уравнений

$$\begin{cases} \psi_{j+1} + u_j\psi_j + \psi_{j-1} = 0, & j = \overline{1, N-1} \\ \psi_1 + (u_0/2 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta \\ \psi_{N-1} + (u_N/2 + ik\Delta)\psi_N = 0 \end{cases}.$$

Будем искать решение уравнения (1.21) в виде

$$\psi_{j+1} = R_j\psi_j. \quad (1.25)$$

Подстановка (1.25) в (1.21) приводит к $(R_j + u_j)\psi_j + \psi_{j-1} = 0 \Rightarrow \psi_j = -\psi_{j-1}/(R_j + u_j)$. Со-
поставив последнее уравнение с $\psi_j = R_{j-1}\psi_{j-1}$, получим рекуррентное соотношение для
вспомогательных функций R_j :

$$R_{j-1} = -\frac{1}{R_j + u_j}. \quad (1.26)$$

Граничное условие для R_j следует записать на правой границе, поскольку в этом случае
оно будет однородным и независимым от волновой функции. Для этого сделаем замену
 ψ_N на $R_{N-1}\psi_{N-1}$ в уравнении (1.24):

$$[1 + (0.5u_N + ik\Delta)R_{N-1}]\psi_{N-1} = 0. \quad (1.27)$$

Ввиду того, что ψ_{N-1} - произвольная функция, равенство (1.27) будет выполняться при
условии

$$R_{N-1} = \frac{-1}{0.5u_N + ik\Delta}. \quad (1.28)$$

Соотношения (1.25), (1.26) и (1.28) позволяют вычислить волновую функцию во всех
узлах сетки. Действительно, стартуя с R_{N-1} , определяемого равенством (1.28), будем дви-
гаться в обратном направлении (от $N-1$ к 0 с шагом -1), последовательно вычисляя с
помощью рекуррентного соотношения (1.26) вспомогательные коэффициенты
 $R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_1, R_0$. Используя выражение $\psi_1 = R_0\psi_0$ с известным R_0 , из уравнения (1.23)
получим $R_0\psi_0 + (0.5u_0 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta$, т.е.

$$\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 + 0.5u_0 + ik\Delta}. \quad (1.29)$$

Наконец, двигаясь в обратном направлении (от 0 до $N-1$ с шагом 1), последова-
тельно найдем волновую функцию во всех внутренних узлах сетки: $\psi_1, \psi_2, \psi_j, \dots, \psi_N$. Ам-
плитудные коэффициенты r и t , определяющие соответственно коэффициенты прохожде-
ния T и отражения R , могут быть получены из соотношений $r = \psi_0 - 1$ и $t = \psi_N$.

Отметим, что для вычисления оставшихся элементов r' и t' матрицы рассеяния следует переформулировать задачу, располагая источник частиц справа от мишени.

В заключение данного параграфа сформулируем алгоритм численного расчета коэффициентов прохождения T и отражения R как функций энергии E , который может быть реализован на любом языке программирования.

0. Задаем энергию электрона E , шаг сетки Δ и вычисляем $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

1. Вычисляем $R_{N-1} = \frac{-1}{-1 + ik\Delta + m\Delta^2(E - V_N)/\hbar^2}$.

2. С помощью рекуррентной формулы $R_{j-1} = \frac{-1}{R_j - 2 + 2m\Delta^2(E - V_j)/\hbar^2}$, изменяя j от $N-1$ до 1 с шагом -1 , находим $R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_j, \dots, R_1, R_0$.

3. Вычисляем $\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{R_0 - 1 + m\Delta^2(E - V_0)/\hbar^2 + ik\Delta}$.

4. Пользуясь рекуррентным соотношением $\psi_{j+1} = R_j\psi_j$, находим $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_j, \dots, \psi_N$ (изменяем j от 0 до $N-1$ с шагом 1).

5. Определяем $r = \psi_0 - 1$ и $t = \psi_N$ и вычисляем $T = |t|^2$ и $R = |r|^2$.

Продельвая пункты **0-5** для каждого значения E , получаем зависимости $T(E)$ и $R(E)$.

Замечание 1. Все выражения, входящие в пункты **0-5**, необходимо предварительно переписать в безразмерном виде (см. Приложение 2).

Замечание 2. Для ряда задач, в которых требуется вычислить только зависимость коэффициента прохождения от энергии $T(E)$, предложенный алгоритм может быть модифицирован. А именно, после пункта **3** можно сразу переходить к вычислению амплитуды отражения r и далее с учетом $|r|^2 + |t|^2 = 1$ найти коэффициент прохождения T .

1.6. Примеры численных расчетов с использованием последовательного алгоритма

На основе предложенного в предыдущем параграфе последовательного алгоритма были написаны программы, позволяющие для произвольного потенциала $V(x)$: 1) нахо-

дить волновую функцию во внутренней области при фиксированной энергии E электрона (рис. 1.5); 2) строить энергетические зависимости коэффициентов прохождения T и отражения R . В качестве среды программирования был выбран пакет *Mathematica*.

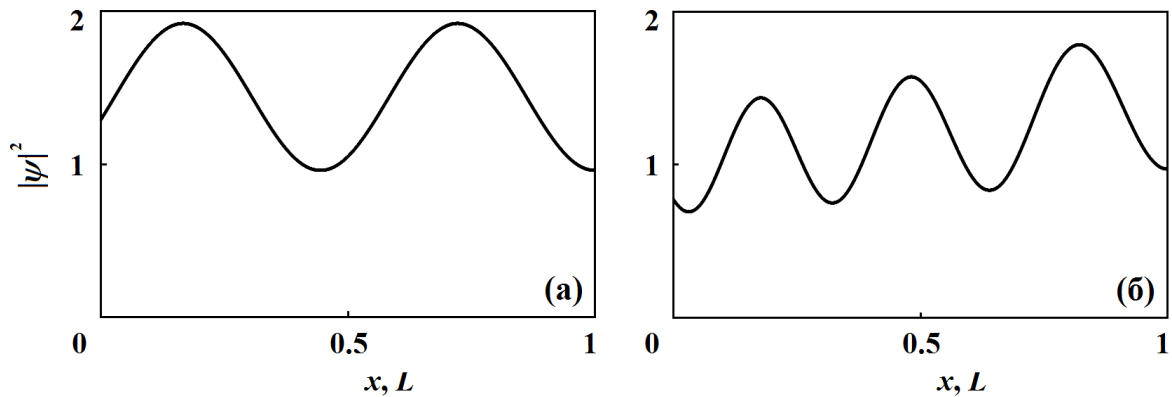


Рисунок 1.5. Квадрат модуля волновой функции электрона с энергией (а) $E = 32E_0$ при рассеянии на прямоугольной потенциальной яме глубины $V_0 = 16E_0$ и (б) $E = 64E_0$ при рассеянии на треугольном потенциальном барьере высоты $V_0 = 16E_0$

Для тестирования программ могут быть предложены (как минимум) два критерия. Во-первых, вследствие сохранения потока вероятности найденные численно амплитуды r и t должны удовлетворять условию $|r|^2 + |t|^2 = 1 \Leftrightarrow T + R = 1$. Во-вторых, при соответствующей возможности, тестами могут служить известные аналитические решения модельных задач. Для проверки правильности работы программ на основе алгоритма, предложенного в п. 1.5, в качестве теста можно рассмотреть, например, решение задачи с прямоугольной потенциальной ямой (см. п. 1.4). Сравнение результатов численного счета с аналитическим решением (1.20) представлено на рис. 1.6.

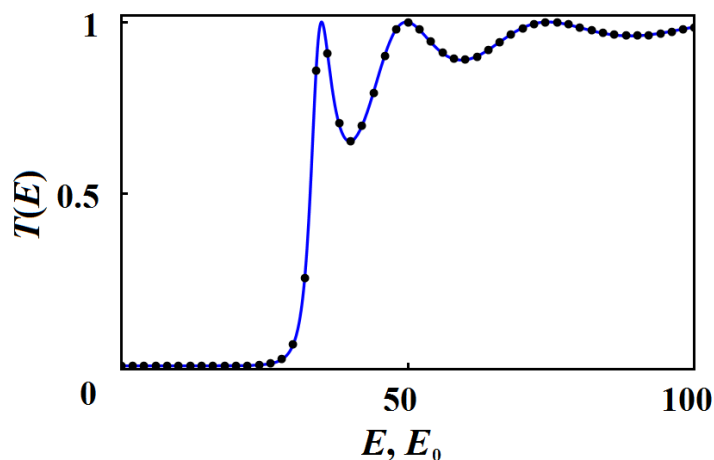


Рисунок 1.6. Зависимость коэффициента прозрачности T от энергии частицы E при ее прохождении над прямоугольной потенциальной ямой. Синяя кривая – аналитическое решение, черные точки – результат численных расчетов. В качестве расчетных параметров использованы указанные для рис. 1.3 значения

В заключение первой части отметим, что предложенный в предыдущем параграфе последовательный алгоритм фактически решает задачу рассеяния методом прогонки. Можно показать, что такой способ решения требует выполнения $O(N)$ операций. Для одномерной задачи, в зависимости от мощности компьютера, число расчетных узлов N может быть выбрано достаточно большим. Поэтому во многих случаях для нахождения коэффициентов прохождения и отражения для барьера сложной формы бывает достаточно использовать последовательную версию программы даже при необходимости расчета указанных величин для большого числа значений энергии электрона E .

Часть 2. Задача рассеяния в квантовой механике.

Параллельная версия

В многочисленных приложениях квантовой механики (например, в атомной физике, физике твердого тела и теории наноструктур) возникает необходимость в решении многомерных [7, 8] задач рассеяния. Однако, в отличие от одномерных аналогов, они требуют серьезных вычислительных ресурсов. Более того, многие из этих задач не могут быть решены с использованием стандартных последовательных алгоритмов за сколь-нибудь приемлемое для физика-вычислителя время. В этой связи возникает потребность в разработке параллельных алгоритмов, позволяющих ускорить процесс вычисления.

В данной части пособия предложен параллельный алгоритм для вычисления коэффициентов прохождения и отражения в одномерной задаче рассеяния, который может быть адаптирован и для решения многомерных задач. Мы также оценим коэффициент ускорения процесса решения одномерной задачи рассеяния в пакете программирования *Mathematica*, и рассмотрим возможные способы его повышения.

2.1. Параллельный алгоритм решения одномерной задачи рассеяния

Разбиение на блоки

Пусть, в нашем распоряжении есть c вычислительных ядер, на которых могут быть реализованы параллельные вычисления. Вновь, как и раньше, будем решать дискретное уравнение Шредингера $\psi_{j-1} + u_j \psi_j + \psi_{j+1} = 0$, заданное на сетке, состоящей из $N + 1$ узлов с координатами $x_j = j\Delta$, $j = \overline{0, N}$. Для ускорения решения задачи разобьем сетку на c блоков, каждый из которых будет состоять из $p + 1$ узлов. В первый блок поместим узлы, начиная с нулевого и заканчивая p -м узлом. Второй блок будет содержать узлы, номер которых пробегает значения от p до $2p$, в третий – от $2p$ до $3p$ и т.д. В ходе такого разбиения в i -й блок помещаются узлы, номера которых принимают значения от $(i-1)p$ до ip . В частности, последний блок с номером c включает узлы с индексами от $(c-1)p$ до cp . Ясно, что число N всегда можно выбрать так, чтобы полученное разбиение имело место. Отметим, что узлы с номерами кратными p попадают сразу в два блока.

Пример. Разобьем указанным способом сетку, состоящую из 1001 узла, на $c = 10$ блоков (в данном случае $p = 100$). Результат разбиения может быть оформлен в виде таблицы 1.

Таблица 1. Разбиение сетки из 1001 узла на 10 блоков.

Номер блока	Номера узлов, попадающих в блок
1	От 0 до 100 включительно
2	От 100 до 200 включительно
3	От 200 до 300 включительно
4	От 300 до 400 включительно
5	От 400 до 500 включительно
6	От 500 до 600 включительно
7	От 600 до 700 включительно
8	От 700 до 800 включительно
9	От 800 до 900 включительно
10	От 900 до 1000 включительно

Прогонка в отдельном блоке

После разбиения вычислительной сетки на блоки перейдем к построению решения разностного уравнения

$$\psi_{j+1} + u_j \psi_j + \psi_{j-1} = 0, \quad j = \overline{1, N-1}. \quad (2.1)$$

Для этого рассмотрим сегмент, содержащий узлы i -го блока, т.е. узлы с номерами $j = \overline{(i-1)p, ip}$. В силу линейности уравнения (2.1) внутри сегмента, его решение может быть представлено в виде:

$$\psi_j = P_j \psi_{(i-1)p} + Q_j \psi_{ip}, \quad (2.2)$$

где $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$ ($j = \overline{(i-1)p, ip}$) - два подлежащих определению вектора с неопределенными коэффициентами. Подстановка (2.2) в (2.1) приводит к уравнению:

$$(P_{j+1} + u_j P_j + P_{j-1}) \psi_{(i-1)p} + (Q_{j+1} + u_j Q_j + Q_{j-1}) \psi_{ip} = 0, \quad (2.3)$$

из которого следует, что

$$\begin{cases} P_{j+1} + u_j P_j + P_{j-1} = 0 \\ Q_{j+1} + u_j Q_j + Q_{j-1} = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

Положив в уравнении (2.2) $j = (i-1)p$, получим равенство $\Psi_{(i-1)p} = P_{(i-1)p} \Psi_{(i-1)p} + Q_{(i-1)p} \Psi_{ip}$, из которого найдем

$$\begin{cases} P_{(i-1)p} = 1 \\ Q_{(i-1)p} = 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

Аналогично, потребовав $j = ip$ в уравнении (2.2), придем к

$$\begin{cases} P_{ip} = 0 \\ Q_{ip} = 1 \end{cases} \quad (2.6)$$

Таким образом, мы имеем дело с двумя системами разностных уравнений

$$\begin{cases} P_{j+1} + u_j P_j + P_{j-1} = 0, j = \overline{(i-1)p + 1, ip - 1} \\ P_{(i-1)p} = 1, P_{ip} = 0 \end{cases}, \quad (2.7)$$

$$\begin{cases} Q_{j+1} + u_j Q_j + Q_{j-1} = 0, j = \overline{(i-1)p + 1, ip - 1} \\ Q_{(i-1)p} = 0, Q_{ip} = 1 \end{cases}. \quad (2.8)$$

С вычислительной точки зрения уравнения (2.4) замечательны тем, что они могут быть решены независимо на каждом сегменте, на которые была разбита внутренняя область. Следовательно, для поиска их можно использовать метод распределенных вычислений, при котором расчет для различных сегментов (блоков) осуществляется на различных (параллельных) ядрах.

Будем искать решение системы (2.7) в виде

$$P_{j+1} = Z_j P_j. \quad (2.9)$$

После подстановки (2.9) в первое уравнение системы (2.7) приходим к

$$(Z_j + u_j)P_j + P_{j-1} = 0 \Rightarrow P_j = \frac{-1}{Z_j + u_j} P_{j-1}. \quad (2.10)$$

Вместе с тем $P_j = Z_{j-1}P_{j-1}$. Сравнение последнего выражения с (2.10) дает

$$Z_{j-1} = \frac{-1}{Z_j + u_j}. \quad (2.11)$$

При $j = ip - 1$ выражение (2.9) принимает вид $P_{ip} = Z_{ip-1}P_{ip-1} = 0$, и, как следствие,

$$Z_{ip-1} = 0. \quad (2.12)$$

Начав с (2.12) и далее используя рекуррентное соотношение (2.11), можно последовательно вычислить набор вспомогательных коэффициентов $Z_{ip-1}, Z_{ip-2}, \dots, Z_{(i-1)p}$. Наконец, осуществляя обратный ход (начинаем с $P_{(i-1)p} = 1$ и используем (2.9)), друг за другом найдем $P_{(i-1)p} = 1, P_{(i-1)p+1}, P_{(i-1)p+2}, \dots, P_j, \dots, P_{ip} = 0$. Таким образом, описанный вычислительный процесс позволяет найти набор коэффициентов $\{P_j\}$, входящих в выражение (2.2).

Для получения другого набора коэффициентов $\{Q_j\}$ необходимо решить систему разностных уравнений (2.8), которая, в отличие от (2.7), имеет нулевое граничное условие на левом конце. Для ее решения следует осуществить прогонку в обратном направлении. Будем искать решение системы (2.8) в виде

$$Q_j = X_{j+1}Q_{j+1} \quad (2.13)$$

и, подставив (2.13) в первое уравнение, получим

$$Q_{j+1} + (u_j + X_j)Q_j = 0 \Rightarrow Q_j = \frac{-1}{u_j + X_j} Q_{j+1}. \quad (2.14)$$

Сопоставление формул (2.13) и (2.14) приводит к рекуррентному соотношению

$$X_{j+1} = \frac{-1}{u_j + X_j}. \quad (2.15)$$

Положив в (2.13) $j = (i-1)p$, запишем $Q_{(i-1)p} = X_{(i-1)p+1}Q_{(i-1)p+1} = 0$, т. е.

$$X_{(i-1)p+1} = 0. \quad (2.16)$$

Выражения (2.15) и (2.16) позволяют рекуррентно вычислить набор вспомогательных коэффициентов $X_{(i-1)p+1}, X_{(i-1)p+2}, \dots, X_{ip}$. Наконец, путем обратной прогонки от $Q_{ip} = 1$ с учетом (2.13) последовательно найдем $Q_{ip} = 1, Q_{ip-1}, \dots, Q_j, \dots, Q_{(i-1)p} = 0$. Набор коэффициентов $\{Q_j\}$ вместе с полученным ранее множеством $\{P_j\}$ позволяет согласно (2.2) вычислить волновую функцию в узлах i -го блока по известным значениям волновой функции $\psi_{(i-1)p}$ и ψ_{ip} в граничных узлах блоков.

Вычисление волновой функции в граничных узлах блоков

Найдем теперь значения волновой функции в граничных узлах блоков, т.е. в узлах с индексами $j = ip, p = \overline{0, c}$. Для этого рассмотрим i -й и $(i+1)$ -й блоки и запишем уравнение (2.1) относительно их общего узла с индексом ip :

$$\psi_{ip+1} + u_{ip}\psi_{ip} + \psi_{ip-1} = 0. \quad (2.17)$$

Посредством (2.2) ψ_{ip+1} и ψ_{ip-1} , входящие в (2.17), могут быть выражены через значения волновой функции в узлах с индексами $(i-1)p, ip$ и $(i+1)p$:

$$\begin{aligned} \psi_{ip-1} &\equiv \psi_{(i-1)p+p-1} = P_{(i-1)p+p-1}\psi_{(i-1)p} + Q_{(i-1)p+p-1}\psi_{ip} \\ \psi_{ip+1} &= P_{ip+1}\psi_{ip} + Q_{ip+1}\psi_{(i+1)p} \end{aligned} \quad (2.18)$$

С учетом этого (2.17) примет вид

$$P_{(i-1)p+p-1}\psi_{(i-1)p} + (P_{ip+1} + u_{ip} + Q_{(i-1)p+p-1})\psi_{ip} + Q_{ip+1}\psi_{(i+1)p} = 0, \quad i = \overline{1, c-1}. \quad (2.19)$$

Таким образом, известные коэффициенты $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$ позволяют свести задачу нахождения волновой функции во внутренней области к решению системы разностных уравнений (2.19) с числом переменных в $(N+1)/(c+1)$ раз меньшим, чем в исходной сетке.

Уравнение (2.19) по форме совпадает с уравнением (1.21), что позволяет использовать для его решения метод, описанный в первой части пособия.

Для этого необходимо соответствующим образом переписать граничные условия. На правом конце области определения волновой функции граничное условие

$$\psi_{(c-1)p+p-1} + \left(\frac{u_{cp}}{2} + ik\Delta \right) \psi_{cp} = 0 \quad (2.20)$$

с учетом $\psi_{(c-1)p+p+1} = P_{(c-1)p+p-1}\psi_{(c-1)p} + Q_{(c-1)p+p-1}\psi_{cp}$ примет вид

$$P_{(c-1)p+p-1}\psi_{(c-1)p} + \left(Q_{(c-1)p+p-1} + \frac{u_{cp}}{2} + ik\Delta \right) \psi_{cp} = 0. \quad (2.21)$$

Подставив $\psi_1 = P_1\psi_0 + Q_1\psi_p$ в выражение $\psi_1 + (0.5u_0 + ik\Delta)\psi_0 = 2ik\Delta$, для граничного условия на левом конце области получим

$$\left(P_1 + \frac{u_0}{2} + ik\Delta \right) \psi_0 + Q_1\psi_p = 2ik\Delta. \quad (2.22)$$

Мы пришли к следующей системе разностных уравнений:

$$\begin{cases} P_{(i-1)p+p-1}\psi_{(i-1)p} + (P_{ip+1} + u_{ip} + Q_{(i-1)p+p-1})\psi_{ip} + Q_{ip+1}\psi_{(i+1)p} = 0, & \overline{i=1, c-1}, \\ (P_1 + 0.5u_0 + ik\Delta)\psi_0 + Q_1\psi_p = 2ik\Delta, \\ P_{(c-1)p+p-1}\psi_{(c-1)p} + (Q_{(c-1)p+p-1} + 0.5u_{cp} + ik\Delta)\psi_{cp} = 0. \end{cases}$$

Будем искать решение (2.19) в виде

$$\psi_{(i+1)p} = R_i\psi_{ip}. \quad (2.23)$$

Подстановка (2.23) в (2.19) приводит к

$$P_{(i-1)p+p-1}\psi_{(i-1)p} + (P_{ip+1} + u_{ip} + Q_{(i-1)p+p-1} + Q_{ip+1}R_i)\psi_{ip} = 0. \quad (2.24)$$

Сравним полученное равенство с $\psi_{ip} = R_{i-1}\psi_{(i-1)p}$. Очевидно, что

$$R_{i-1} = \frac{-P_{(i-1)p+p-1}}{P_{ip+1} + u_{ip} + Q_{(i-1)p+p-1} + Q_{ip+1}R_i}. \quad (2.25)$$

Заменяя в (2.21) ψ_{cp} на $R_{c-1}\psi_{(c-1)p}$, получим

$$(P_{(c-1)p+p-1} + (Q_{(c-1)p+p-1} + 0.5u_{cp} + ik\Delta)R_{c-1})\psi_{(c-1)p} = 0. \quad (2.26)$$

Следовательно,

$$R_{c-1} = \frac{-P_{(c-1)p+p-1}}{Q_{(c-1)p+p-1} + 0.5u_{cp} + ik\Delta}. \quad (2.27)$$

Начав с (2.27), и далее используя рекуррентное соотношение (2.25), можно последовательно вычислить коэффициенты $R_{c-1}, R_{c-2}, R_{c-3}, \dots, R_1, R_0$. После чего, осуществив в граничном условии (2.22) замену ψ_p на $R_0\psi_0$, найдем

$$\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{P_1 + 0.5u_0 + ik\Delta + Q_1R_0}. \quad (2.28)$$

Наконец, используя (2.23), можно последовательно вычислить значения волновой функции $\psi_0, \psi_p, \psi_{2p}, \dots, \psi_{(c-1)p}, \psi_{cp}$ в граничных узлах блоков и далее по известным коэффициентам $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$ найти значения волновой функции ψ_j во всех $N + 1$ узлах исходной сетки.

В заключение данного параграфа сформулируем параллельный алгоритм вычисления волновой функции во внутренней области.

0. Задаем энергию электрона E , шаг сетки Δ , вычисляем $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ и определяем количество ядер c , которые будут использоваться при параллельных вычислениях.

1. Разбиваем вычислительную сетку из $N + 1$ узлов с координатами $x_j = j\Delta$, $j = \overline{0, N}$ на c блоков. При этом в i -й блок ($i = \overline{1, c}$) входят узлы, номера которых принимают значения от $(i-1)p$ до ip включительно.

2. Внутри каждого блока: ($i = \overline{1, c}$) **параллельно** проводим следующие вычисления.

2.1. Начав с $Z_{ip-1} = 0$ и используя рекуррентное соотношение $Z_{j-1} = \frac{-1}{Z_j + u_j}$, находим

$$Z_{ip-1}, Z_{ip-2}, \dots, Z_j, \dots, Z_{(i-1)p}.$$

2.2. Посредством обратного хода, начиная с $P_{(i-1)p} = 1$ и используя $P_{j+1} = Z_j P_j$, находим набор коэффициентов $\{P_j\} = \{P_{(i-1)p} = 1, P_{(i-1)p+1}, P_{(i-1)p+2}, \dots, P_j, \dots, P_{ip} = 0\}$.

2.3. Начиная с $X_{(i-1)p+1} = 0$, с использованием рекуррентного соотношения

$$X_{j+1} = \frac{-1}{u_j + X_j} \text{ последовательно находим } X_{(i-1)p+1}, X_{(i-1)p+2}, \dots, X_j, \dots, X_{ip}.$$

2.4. Осуществляем обратный ход: начиная с $Q_{ip} = 1$ и используя $Q_j = X_{j+1} Q_{j+1}$, находим набор коэффициентов $\{Q_j\} = \{Q_{ip} = 1, Q_{ip-1}, \dots, Q_j, \dots, Q_{(i-1)p} = 0\}$.

2.5. С каждого ядра, на котором проводятся вычисления 2.1-2.4 для конкретного блока, получаем соответствующие этому блоку наборы коэффициентов $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$, после чего переходим к последовательным вычислениям, возобновляющимся со следующего пункта.

3. Вычисляем $R_{c-1} = \frac{-P_{(c-1)p+p-1}}{Q_{(c-1)p+p-1} + 0.5u_{cp} + ik\Delta}$.

4. Используя рекуррентное соотношение $R_{i-1} = \frac{-P_{(i-1)p+p-1}}{P_{ip+1} + u_{ip} + Q_{(i-1)p+p-1} + Q_{ip+1} R_i}$, находим

вспомогательные коэффициенты $R_{c-1}, R_{c-2}, R_{c-3}, \dots, R_1, R_0$.

5. Вычисляем $\psi_0 = \frac{2ik\Delta}{P_1 + 0.5u_0 + ik\Delta + Q_1 R_0}$.

6. Используя $\psi_{(i+1)p} = R_i \psi_{ip}$, находим значения волновой функции $\psi_0, \psi_p, \psi_{2p}, \dots, \psi_{(c-1)p}, \psi_{cp}$ в граничных точках блоков.

7. Вычисляем волновую функцию ψ_j в остальных узлах сетки, разложением $\psi_j = P_j \psi_{(i-1)p} + Q_j \psi_{ip}$ и найденными в 2.5 наборами коэффициентов $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$.

Замечание 1. Все выражения, входящие в пункты 0-7, необходимо предварительно представить в безразмерном виде (см. Приложение 2).

2.2. Примеры численных расчетов с использованием параллельного алгоритма

На основе изложенного в предыдущем параграфе параллельного алгоритма параграфа алгоритма была написана программа, позволяющая для произвольного потенциала $V(x)$ рассчитывать волновую функцию во внутренней области при фиксированной энергии E электрона. Детали, касающиеся реализации параллельных вычислений в пакете *Mathematica*, который был выбран в качестве среды программирования, обсуждаются в Приложении 3.

После тестирования программы (см. п. 1.6) были получены значения коэффициентов ускорения одномерной задачи рассеяния при различном количестве узлов вычислительной сетки. В таблице 2 приведены данные, характеризующие работу последовательной и параллельной версий программы для нахождения волновой функции во внутренней области. Все расчеты проводились на четырех вычислительных ядрах для случая треугольного потенциального барьера

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in (-\infty, 0) \cup (L, +\infty) \\ V_0, & x \in [0, L] \end{cases} \quad (2.29)$$

Таблица 2. Сравнение параллельных и последовательных вычислений на четырех вычислительных ядрах. **Обозначения:** $N + 1$ - число узлов, t_s - время работы последовательной версии, T_p (T_s) - время выполнения параллельной (последовательной) части в параллельной версии, t_p - общее время работы параллельной версии. Коэффициент ускорения определялся как t_p/t_s .

N	t_s , с.	T_p , с.	T_s , с.	t_p , с.	T_p/t_p , %	T_s/t_p , %	Коэффициент ускорения
10000	0,97	0,281	0,452	0,733	38,34	61,66	1,32
25000	5,37	1,002	2,770	3,772	26,56	73,44	1,42
50000	21,12	3,151	10,36	13,51	23,33	76,67	1,56
100000	184,44	10,92	91,21	102,1	10,69	89,31	1,81
250000	2621,0	85,74	1292	1378	6,22	93,78	1,90
500000	11864	1289	5905	7194	17,92	82,08	1,65

Представленные в таблице 2 данные получены для параметров $L=1$ ($l_0 = L$ - единица длины), $E = 64$ и $V_0 = 32$ (в единицах $E_0 = \hbar^2/ml_0^2$).

Как следует из таб. 2, распараллеливание на четырех ядрах одномерной задачи рассеяния дает для различного числа узлов коэффициент ускорения в пределах от 1,32 до 1,90. Его величина значительно меньше числа ядер. Это связано с тем, что помимо параллельного участка, программа также включает в себя и последовательные вычисления с использованием полученных на параллельном этапе данных. Вместе с прогонкой по сетке с редуцированным числом узлов (пункты 3-6 алгоритма в конце п. 2.1), в результате которой вычисляются значения волновой функции в граничных точках блоков, последовательная часть программы также находит волновую функцию во всех остальных узлах исходной сетки по наборам коэффициентов $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$, полученных на параллельном этапе вычислений. Этот процесс требует дополнительных затрат времени, которые возрастают с увеличением числа узлов. По-видимому, коэффициент ускорения можно увеличить посредством модификации последовательной части параллельной версии. В пакете *Mathematica* это может быть реализовано, например, с помощью автоматического распараллеливания циклов и встроенных функций типа *Table*, отвечающих за формирование списков.

Заключение

В представленном пособии после постановки квантово-механической задачи рассеяния в одномерном случае и элементарного введения в теорию S -матрицы был изложен метод сведения внешней задачи к решению внутренней краевой задачи с комплексными граничными условиями. В качестве примера данный метод был применен для аналитического решения задачи о прохождении электрона над прямоугольной потенциальной ямой. В конце первой части пособия изложен последовательный алгоритм численного решения одномерной задачи, по своей сути представляющий собой метод прямой и обратной прогонки.

Во второй части пособия продемонстрировано, что предложенный последовательный алгоритм допускает блочное разбиение и, потому, может быть адаптирован для проведения параллельных вычислений на многоядерных процессорах. Далее показано, что параллельные вычисления в среде *Mathematica* с использованием четырех вычислительных ядер позволяют достичь коэффициента ускорения близкого к двум. Последний результат связан с наличием последовательных участков в параллельном алгоритме, и, вероятно, может быть улучшен за счет их модификации, в частности, с применением автоматического распараллеливания циклов в *Mathematica*. Также следует ожидать, что на большем числе ядер коэффициент ускорения будет более значительным.

Кроме того, поскольку при формулировке параллельного алгоритма использовалось блочное разбиение области определения волновой функции, в пособии обсуждалась только параллельная версия, приспособленная для машин с CPU архитектурой. Возможно, использование данного алгоритма для GPU систем вызовет затруднения в связи со спецификой передачи данных в таких системах [9-11].

Остается надеяться, что модификация предложенных алгоритмов для решения многомерных задач рассеяния, а также применение параллельных вычислений в других задачах, станут темами самостоятельных работ студентов и аспирантов физического факультета и, возможно, послужат отправной точкой для их оригинальных исследований в области вычислительной физики.

Приложение 1. Дискретизация уравнения Шредингера

Как было сказано раньше, при численном решении уравнения Шредингера (1.1) во внутренней области $x \in [0, L]$, эта область разбивается на N одинаковых отрезков длины Δ , концы которых образуют сетку из $N + 1$ узлов с координатами $x_j = j\Delta$, $j = \overline{0, N}$ (см. рис. 1.4). Покажем теперь, как может быть получен дискретный аналог уравнения Шредингера (1.1).

Заменяем входящие в уравнение (1.1) функции их значениями в j -м узле и запишем

$$\psi_j'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_j)\psi_j = 0. \quad (\text{П1})$$

Для аппроксимации производной функции $f(x)$, заданной на дискретной сетке, могут быть предложены два варианта [5]. Один из них называется левой разностной производной и записывается как $f'_{j-} = (f_j - f_{j-1})/\Delta$, другой – правой разностной производной $f'_{j+} = (f_{j+1} - f_j)/\Delta$. Используя данные определения, проделаем следующие вычисления:

$$\psi_j'' \approx \psi_{j+}'' = \frac{\psi'_{j+1} - \psi'_j}{\Delta} \approx \frac{(\psi_{j+1} - \psi_j) - (\psi_j - \psi_{j-1})}{\Delta^2} = \frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{\Delta^2}. \quad (\text{П2})$$

Получен трехточечный шаблон для второй производной

$$\psi_j'' = \frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{\Delta^2}, \quad (\text{П3})$$

имеющий второй порядок точности по Δ . Подставив его в (П1), получим дискретный аналог уравнения Шредингера

$$\psi_{j+1} + u_j \psi_j + \psi_{j-1} = 0, \quad j = \overline{1, N-1}, \quad (\text{П4})$$

где $u_j = -2 + 2m\Delta^2(E - V_j)/\hbar^2$, $V_j \equiv V(x_j)$.

Приложение 2. Переход к безразмерным переменным в уравнении Шредингера

Зачастую в уравнения входят величины, порядки которых сильно отличаются. Например, уравнение (1.21) содержит функцию $u_j = -2 + 2m\Delta^2(E - V_j)/\hbar^2$, в которую кроме числа $2 = 2 \cdot 10^0$ также входят масса электрона $m = 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг и постоянная Планка $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. В таких случаях применение численных методов непосредственно к уравнениям, содержащим величины разных порядков, может по ряду причин [12] приводить к значительным погрешностям и даже к ошибочным результатам. В этой связи целесообразно предварительно представить уравнения в безразмерном виде.

Важен рациональный выбор таких единиц измерения, в которых входящие в уравнения величины имели бы близкие порядки. После того как такой выбор сделан, уравнения переписываются в выбранных единицах (этот процесс называется обезразмериванием) и решаются. После проведения расчетов полученные результаты могут быть переведены в исходные единицы измерений.

Рассмотрим один из возможных способов обезразмеривания одномерной задачи рассеяния. Выберем в качестве основных единиц постоянную Планка \hbar , массу электрона m и длину внутренней области L и выразим через них все остальные величины, входящие в решаемые уравнения. Тогда в качестве единицы измерения волнового числа k_0 может быть взята величина, обратная единице длины, т.е. $k_0 = 1/L$. Вспомнив также, что энергия самого низкого энергетического уровня в бесконечно глубокой потенциальной яме ширины L есть $\pi^2\hbar^2/2mL^2$, и, отбросив безразмерный множитель $\pi^2/2$, получим единицу измерения энергии $E_0 = \hbar^2/mL^2$. Тогда безразмерные величины будут иметь вид

$$\bar{l} = \frac{l}{L}, \quad \bar{k} = \frac{k}{k_0}, \quad \bar{E} = \frac{E}{E_0}. \quad (\text{П5})$$

Теперь перепишем последовательный алгоритм (п.1.5) в безразмерных величинах (П5). В частности,

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Rightarrow kl = \sqrt{\frac{2ml^2E}{\hbar^2}} \Rightarrow k/(1/L) = \sqrt{\frac{2E}{\hbar^2/mL^2}} \Leftrightarrow \bar{k} = \sqrt{2\bar{E}}$$

$$R_{N-1} = \frac{-1}{-1 + ik\Delta + m\Delta^2(E - V_N)/\hbar^2} = \frac{-1}{-1 + i\frac{k}{1/l}\frac{\Delta}{l} + \frac{\Delta^2}{l^2}\frac{E - V_N}{\hbar^2/ml^2}} = \frac{-1}{-1 + ik\bar{\Delta} + (\bar{E} - \bar{V}_N)\bar{\Delta}^2}. \quad (\text{П6})$$

Продельвая схожие преобразования и для других пунктов алгоритма, запишем его в безразмерном виде

0. Задаем энергию электрона \bar{E} , шаг сетки $\bar{\Delta}$ и вычисляем $k = \sqrt{2\bar{E}}$.

1. Вычисляем $R_{N-1} = \frac{-1}{-1 + ik\bar{\Delta} + (\bar{E} - \bar{V}_N)\bar{\Delta}^2}$.

2. С использованием рекуррентной формулы $R_{j-1} = \frac{-1}{R_j - 2 + 2(\bar{E} - \bar{V}_j)\bar{\Delta}^2}$, изменяя j от

$N-1$ до 1 с шагом -1 , находим $R_{N-2}, R_{N-3}, \dots, R_j, \dots, R_1, R_0$.

3. Вычисляем $\psi_0 = \frac{2ik\bar{\Delta}}{R_0 - 1 + (\bar{E} - \bar{V}_0)\bar{\Delta}^2 + ik\bar{\Delta}}$.

4. Согласно $\psi_{j+1} = R_j\psi_j$, изменяя j от 0 до $N-1$ с шагом 1 , находим $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_j, \dots, \psi_N$.

5. Определяем $r = \psi_0 - 1$ и $t = \psi_N$ и вычисляем $T = |t|^2$ и $R = |r|^2$.

Продельвая пункты **0-5** для каждого значения \bar{E} , получаем зависимости $T(\bar{E})$ и $R(\bar{E})$.

Аналогично можно переписать в безразмерном виде выражения для параллельного алгоритма (п. 2.1).

Приложение 3. Элементы параллельного программирования в пакете *Mathematica*

Общая информация

Ориентированный на проведение математических и научно-технических расчетов пакет программирования *Mathematica* среди множества замечательных возможностей, предоставляемых пользователю, также поддерживает проведение параллельных вычислений. В данном приложении кратко обсуждается распараллеливание программ на многоядерных процессорах (multi-core machines). Более полное изложение этого и других подходов с множеством примеров, иллюстрирующих детали, можно найти в *Help Mathematica: Core Language* → *Parallel Programming* → *Tutorials* → *Parallel Computing Tools User Guide*.

При вычислениях на нескольких ядрах *Mathematica* автоматически создает *Single Master Mathematica* – аналог планировщика задач, который осуществляет распределение ресурсов и вычислений, синхронизацию и др., но сам ничего не вычисляет. Последующие параллельные вычисления в *Mathematica* включают в себя:

1. Определение числа ядер, доступных для параллельных вычислений в *Mathematica*.

Это делается автоматически. Пользователь может получить соответствующую информацию с помощью функции *\$ProcessorCount*.

2. Распределение вычислений по ядрам.

С помощью встроенных функций пользователь имеет возможность самостоятельно распределять вычисления по доступным ядрам. При этом, как правило, ядра загружаются равномерно.

3. Вычисления.

4 Синхронизация.

Даже при одинаковой загрузке ядер время их работы может различаться. В связи с этим необходимо дождаться окончания работы все ядер, получить с каждого необходимые данные и перейти к последующим вычислениям.

Отметим, что существуют два подхода к распараллеливанию программ в *Mathematica*. Первый из них можно назвать «наивным» или высокоуровневым распараллеливанием, при котором все описанные этапы автоматизированы. Такой подход реализуется посредством использования функции *Parallelize* или заменой стандартных функций *Mathematica*, таких как *Table*, *Do* или *Sum*, их параллельными аналогами *ParallelTable*, *ParallelDo* и *ParallelSum*, соответственно. Альтернативный подход может быть назван

«явным» или низкоуровневым распараллеливанием, при котором пользователь, добавляя в код необходимые изменения, осуществляет все этапы распараллеливания самостоятельно, имея возможность управлять деталями вычислений. Пример применения такого подхода к распараллеливанию одномерной задачи рассеяния будет дан ниже.

Контроль параллельных вычислений

Существует два способа контроля параллельных вычислений в *Mathematica*. Первый из них предполагает использование диспетчера задач, встроенного в операционную систему *Windows*. Из рис. П1 видно, что, в отличие от выполнения последовательной части программы (рис. П1б), во время работы параллельной секции (рис. П1а) загрузка всех ядер максимальна.

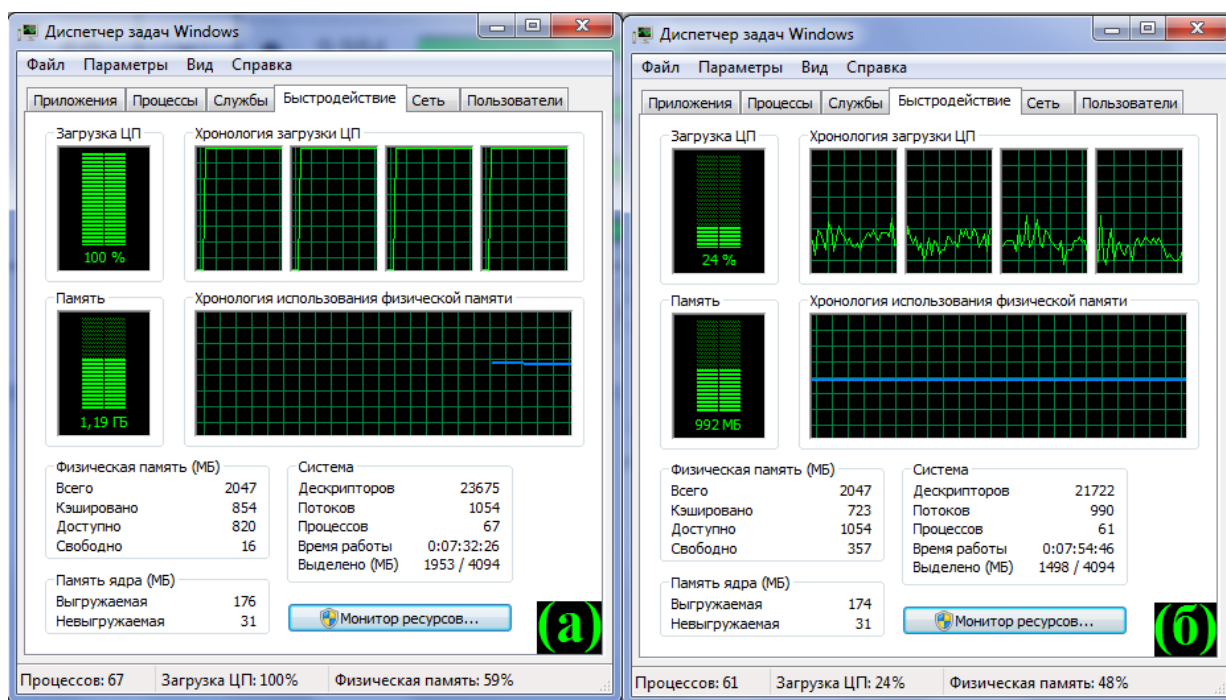


Рисунок П1. Диспетчер задач во время работы (а) параллельной и (б) последовательной секций программ

Другой способ – использовать инструмент *Parallel Kernel Status* (*Menu* → *Evaluation* → *Parallel Kernel Status*). Во время параллельных вычислений он показывает количество занятых ядер (рис. П2а), а по окончании параллельной секции позволяет оценить их загруженность (рис. П2б).

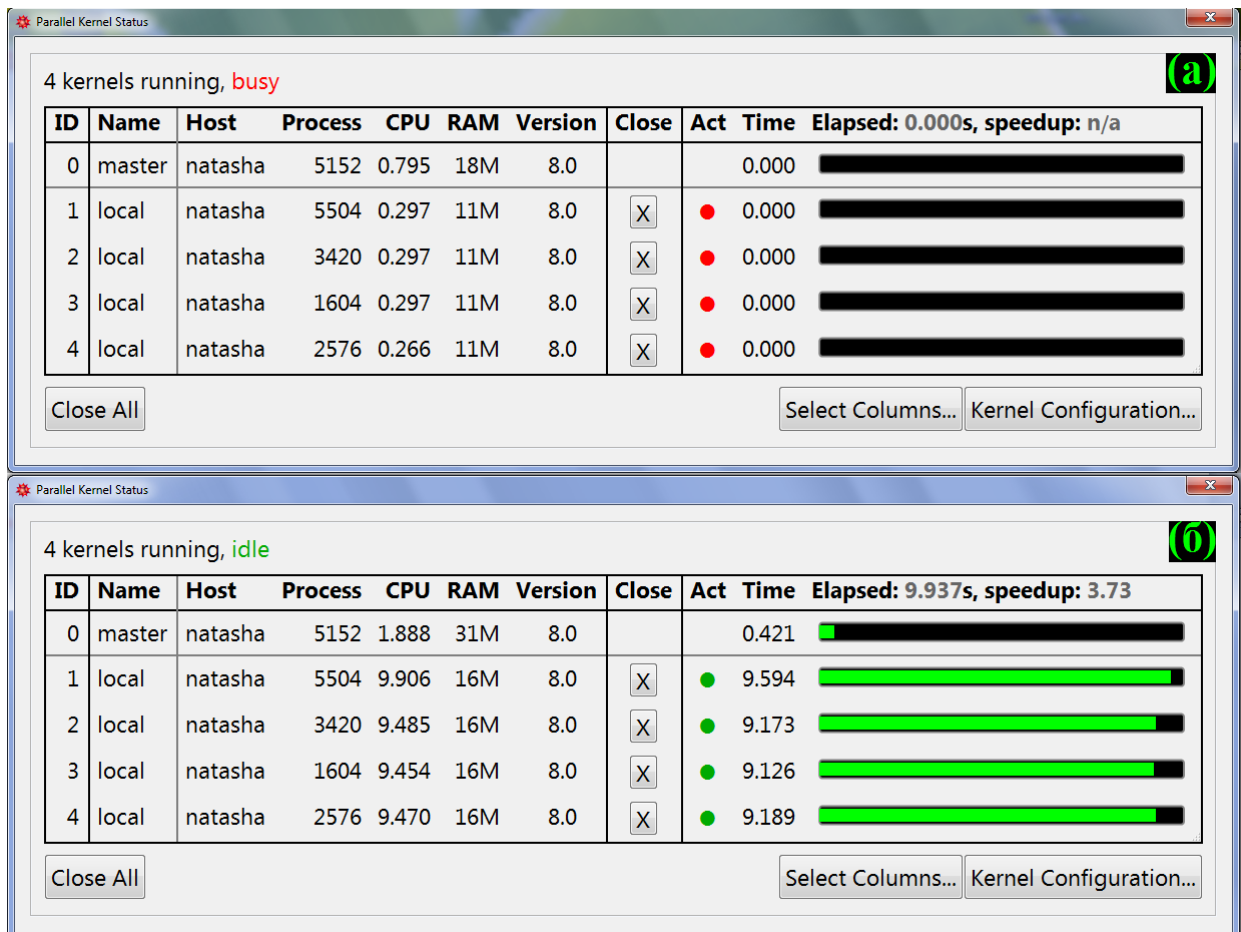


Рисунок П2. Parallel Kernel Status (а) во время работы параллельной секции и (б) после ее окончания

Пример

В качестве примера параллельных вычислений в *Mathematica* рассмотрим один из возможных вариантов реализации параллельной части алгоритма (п. 2.1) (см. листинг П1). Для этого напишем функцию *Coefficients*, вызов которой на каждом из ядер будет вычислять коэффициенты $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$ для соответствующего блока. После этого, определив с помощью функции *\$ProcessorCount* количество доступных ядер *cores*, разобьем исходную сетку на блоки *blocks*. За счет функции *Distribute Definitions*, содержащей в качестве аргументов *Coefficients* и *blocks*, каждое ядро будет «знать» про них.

Наконец, функция *ParallelSubmit* осуществляет распараллеливание, отправляя блоки доступным для вычисления ядрам, при этом возвращая с них соответствующие блокам наборы коэффициентов $\{P_j\}$ и $\{Q_j\}$. Синхронизация вычислений производится с помощью функции *WaitAll*.

Листинг III. Вычисление волновой функции во внутренней области (параллельная часть).

```

count = 1000; (* число узлов равно count+1 *)
delta = 1 / count; (* шаг сетки *)
energy = 64.0; (* энергия электрона *)
strength = 32.0; (* высота потенциального барьера *)

V[x_] := If[Or[x ≤ 0, x ≥ 1] == True, 0, strength * x]; (* треугольный потенциальный барьер *)

Coefficients[data_(* одномерный список *)] := Module[{v, r, p, q, z, x, plist, zlist, qlist, xlist},

  v = data; r = Length[v]; (* входной список и его длина *)

  plist = {}; zlist = {};

  z = 0; PrependTo[zlist, z];

  Do[z =  $\frac{-1}{z + v[[i]]}$ ; PrependTo[zlist, z], {i, r - 1, 2, -1}];
  (* вычисление вспомогательной функции z в узлах сетки *)

  p = 1; AppendTo[plist, p];

  Do[p = zlist[[i]] * p; AppendTo[plist, p], {i, 1, Length[zlist], 1}];

  (* вычисление вспомогательных коэффициентов {Pi} в узлах сетки *)
  qlist = {}; xlist = {};

  x = 0; AppendTo[xlist, x];

  Do[x =  $\frac{-1}{x + v[[j]]}$ ; AppendTo[xlist, x], {j, 2, r - 1, 1}];
  (* вычисление вспомогательной функции x в узлах сетки *)

  q = 1; PrependTo[qlist, q];
  Do[q = xlist[[j]] * q; PrependTo[qlist, q], {j, Length[xlist], 1, -1}];

  (* вычисление вспомогательных коэффициентов {Qi} в узлах сетки *)

  Table[{plist[[j]], qlist[[j]]}, {j, 1, Length[plist], 1}

  (* объединение коэффициентов {Pi} и {Qi} в единый список {Pi, Qi} *)];

t0 = AbsoluteTime[]; (* начало работы параллельной части *)

cores = $ProcessorCount; (* определяем число доступных для вычисления ядер *)

n = IntegerPart[ $\frac{\text{count}}{\text{cores}}$ ]; (* на каждое ядро посылается блок из n+1 узлов *)

blocks = Table[
  Table[-2 + 2 * (delta) ^ 2 * (energy - V[i * delta]), {i, (j - 1) * n, j * n, 1}], {j, 1, cores, 1}];
(* разбиение count+1 узлов сетки на cores блоков, каждый из которых содержит n+1 узлов. *)

DistributeDefinitions[Coefficients, blocks]; (* каждое ядро знает про функцию Coefficients и список blocks *)

coefficients = WaitAll[
  Table[ParallelSubmit[{j}, Coefficients[blocks[[j]]], {j, 1, cores, 1}
  ]];

t1 = AbsoluteTime[]; (* окончание параллельной части программы *)

```

В *Mathematica* время выполнения той или иной части программы можно узнать с помощью применения функции *AbsoluteTime*, возвращающей количество секунд, прошедших с 1 января 1900 г. Так, время работы представленной на листинге параллельной секции вычислялось как разность отчетов t_1 и t_0 взятых соответственно в конце и начале секции.

Литература

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. Квантовая механика (Нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989.
2. D.J. Griffiths. Introduction to Quantum Mechanics. New Jersey: Prentice Hall, 2005.
3. P. Markos, C.M. Soukoulis. Propagation waves. Princeton: Princeton University Press, 2008.
4. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
5. В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. Основы наноэлектроники, М.: Университетская книга; Логос; Физматкнига, 2006.
6. А.А. Самарский. Введение в теорию разностных схем, М.: Наука, 1971.
7. С. Кунин. Вычислительная физика, М.: Мир, 1992.
8. Р. Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц, М.: Мир, 1969.
9. В.П. Гергель. Курс лекций «Параллельное программирование», Н. Новгород: ННГУ, 2005.
10. В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. Параллельные вычисления, СПб: БХВ-Петербург, 2004.
11. М.П. Левин. Параллельное программирование с использованием OpenMP, М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014.
12. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. Численные методы, М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013.