

УДК 530.145, 519.6

М.А. БЕЛОВ

ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ МЕТОДА ФУРЬЕ С РАЗДЕЛЕННЫМ ШАГОМ

Accuracy estimation of Split-Step Fourier method for solving time-dependent Schrodinger equation, adopted for heterogeneous computational clusters, including GRID systems, was performed. The estimation is based on comparison of numerical solution with analytical one, which is obtained via path integrals technique.

Современный прогресс в области нанoeлектроники и литографии сделал возможным производство сверхминиатюрных устройств. Перенос заряда в этих устройствах обычно происходит в условиях так

называемого режима квантового ограничения и требует анализа на квантовом уровне описания явлений. Для этого необходимо получить численное решение временного уравнения Шрёдингера вида

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

которое описывает эволюцию волновой функции.

При рассмотрении многомерных систем огромные объемы вычислений требуют использования параллельных алгоритмов и суперкомпьютеров. Алгоритмы, применяемые для решения уравнения (1) в гомогенной вычислительной системе с распределенной моделью памяти, хорошо известны [1, 2], однако сегодня широкое распространение получают гетерогенные вычислительные кластеры, в первую очередь GRID-системы. В отличие от гомогенных кластеров, в которых обеспечено единство программных и аппаратных средств узлов, приводящее к одинаковой производительности вычислений, в гетерогенных кластерах могут быть применены различные программные и аппаратные средства узлов. Алгоритмы, предназначенные для работы на гомогенных кластерах, неспособны эффективно использовать вычислительную мощность гетерогенных кластеров. Именно поэтому важны исследования реализаций методов решения уравнения (1), которые могут эффективно функционировать в гетерогенных вычислительных средах.

При решении уравнения (1) конечно-разностными методами возникают трудности, обусловленные отсутствием в них механизмов контроля сохранения нормы волновой функции и необходимостью использования неявных одношаговых либо явных многошаговых разностных схем, обеспечивающих устойчивость [3]. Для преодоления этих трудностей при квантовомеханических расчетах обычно используют методы, называемые симплектическими интеграторами [4]. Эти методы, примененные к временному уравнению Шрёдингера, являются безусловно устойчивыми, точно сохраняющими норму волновой функции, не расходящимися и дающими малую ошибку даже при значительном размере шага по времени.

Эволюция волновой функции за заданный промежуток времени Δt определяется выражением

$$\psi(x, t + \Delta t) = \hat{G}(\Delta t) \psi(x, t),$$

где эволюционный оператор может быть формально введен как

$$\hat{G}(\Delta t) = \exp\left(\frac{\Delta t \hat{H}}{i\hbar}\right). \quad (2)$$

В наиболее известном симплектическом интеграторе – методе Крэнка – Никольсона – эволюционный оператор приближают с помощью формы Кэйли, представляющей его в качестве операторной дроби [5]. Такой подход может быть использован на гетерогенных кластерах благодаря применению соответствующей библиотеки подпрограмм линейной алгебры [6], однако алгоритмы этой библиотеки слабо оптимизированы для работы в гетерогенной вычислительной среде. Кроме того, данный метод применяется для одномерного случая, так как в многомерном случае он трудно реализуем [5].

В настоящей статье будет рассмотрен метод Фурье с разделенным шагом, имеющий разделенный эволюционный оператор, получаемый из (2) посредством применения формулы Хаусдорфа – Кэмпбелла с точностью до членов порядка Δt^3 и задаваемый выражением [1]:

$$\exp\left(\frac{\Delta t \hat{H}}{i\hbar}\right) = \exp\left(\frac{\Delta t U(\mathbf{r}, t)}{2i\hbar}\right) \exp\left(\frac{\Delta t}{2i\hbar} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\right) \exp\left(\frac{\Delta t U(\mathbf{r}, t)}{2i\hbar}\right) + O(\Delta t^3). \quad (3)$$

Левая и правая экспоненты в правой части выражения (3) являются операторами умножения на число в x -представлении. Экспоненциал в выражении (3) – это операция умножения на число в p -представлении. Переход между пространственным и импульсным представлением производится с помощью прямого и обратного фурье-преобразования, операторы которых обозначим F и F^{-1} соответственно. Окончательно эволюционный оператор может быть записан следующим образом:

$$\hat{G}(\Delta t) = \exp\left(\frac{\Delta t U(x, y, t)}{2i\hbar}\right) \hat{F}^{-1} \exp\left(\frac{\Delta t p^2}{2i\hbar}\right) \hat{F} \exp\left(\frac{\Delta t U(x, y, t)}{2i\hbar}\right).$$

Очевидно, что этот оператор является унитарным, следовательно, при его применении норма волновой функции сохраняется.

Нами будет произведена оценка точности метода Фурье с разделенным шагом посредством сравнения результатов с аналитическими, полученными при применении техники интегралов по траекториям к движению в прямоугольном двумерном канале.

Параллельная реализация метода Фурье с разделенным шагом.

Предварительное распределение нагрузки

Реализация метода Фурье с разделенным шагом в гомогенной вычислительной среде описана в [1]. В поставленной задаче вводится прямоугольная пространственная сетка, на узлах которой задаются начальная волновая функция и потенциал. Метод для двумерного случая состоит в последовательном циклическом выполнении ряда операций.

1. Применение правого оператора $\exp\left(\frac{\Delta t U(\mathbf{r})}{2i\hbar}\right)$ к матрице значений волновой функции.
2. Применение дискретного фурье-преобразования к строкам матрицы.
3. Транспонирование матрицы.
4. Применение дискретного фурье-преобразования к строкам полученной матрицы.
5. Применение оператора $\left(\exp\left(\frac{\Delta t \mathbf{p}^2}{2i\hbar}\right)\right)^T$. Так как матрица транспонирована на шаге 3, следует

использовать транспонированный оператор.

6. Применение дискретного обратного фурье-преобразования к строкам полученной матрицы.
7. Транспонирование матрицы.
8. Применение дискретного обратного фурье-преобразования к строкам полученной матрицы.
9. Применение левого оператора $\exp\left(\frac{\Delta t U(\mathbf{r})}{2i\hbar}\right)$.

10. Инкремент времени.

В этом алгоритме используется свойство многомерного преобразования Фурье, позволяющее разбивать это преобразование на серии независимых одномерных операций.

Для эффективного использования гетерогенной вычислительной среды следует распределять нагрузку среди узлов в соответствии с их производительностью. Важно также принимать во внимание параметры линий связи между узлами, а именно скорость передачи данных и величину задержки. Отметим, что определение производительности вычислительного узла довольно сложная задача в связи с ее многофакторностью, основными из которых выступают: количество узлов в системе, возможности оборудования по обработке чисел с плавающей точкой, время выполнения инструкций микропроцессорами, тактовые частоты электронных узлов, версии операционной системы и библиотек. Подходящим способом оценки производительности является ее непосредственное измерение. С этой целью перед началом вычислений происходит тестирование производительности каждого вычислительного узла, представляющее собой проведение преобразования Фурье на массиве той же длины, что и будет использовано в реальных вычислениях. Кроме этого, определяются скорость передачи данных между узлами и задержки линий связи. После этого вычислительная нагрузка распределяется между узлами пропорционально измеренной производительности. Для каждого узла вычисляются относительная скорость работы и количество обрабатываемых строк матрицы.

Ввиду наличия стохастических процессов, таких как сброс кэша диска, событий и сбоев в работе операционной системы измеренная нагрузка идентичных узлов может различаться. Для нейтрализации этого эффекта используется округление результата в соответствии с выражением

$$P_{\text{round}} = \exp(10[0,1 \ln P_i]), \quad (4)$$

где квадратные скобки соответствуют операции округления до целого, P_i – относительная производительность узла с рангом i . Округление (4) также может оказаться полезным, если используется гомогенная вычислительная среда. После округления сведения о вычислительной нагрузке передаются узлам, которые начинают расчет.

Граничные условия первого рода в методе Фурье с разделенным шагом

Эволюционный оператор рассматриваемого метода при его непосредственном применении реализует периодические граничные условия. Однако задачи квантового транспорта обычно предполагают граничные условия первого или второго рода. Метод может быть адаптирован к данным условиям

путем введения потенциального барьера на границе рассматриваемой области, причем высота этого барьера ограничена ввиду того, что экспоненциал

$$\exp\left(\frac{-i\Delta t U(x)}{2\hbar}\right)$$

является периодической функцией потенциала. Если разность потенциалов на соседних узлах сетки становится сравнимой с этим периодом или превышает его, то метод перестает корректно работать. Таким образом, ограничение на высоту потенциального барьера выражается неравенством

$$\frac{\Delta t(U(x+dx) - U(x))}{2\hbar} \ll 2\pi, \quad (5)$$

где dx – длина расстояния между узлами сетки. При замене конечных разностей производными выражение (5) может быть записано в виде

$$U'(x) \ll \frac{4\pi n\hbar}{\Delta t L}, \quad (6)$$

где L – линейный размер рассматриваемой области, n – количество узлов в сетке. Как следует из (6), метод с граничными условиями первого рода применим при использовании ограниченного по высоте барьера. Высота этого барьера дается выражением

$$V = n\pi\hbar\Delta t.$$

Ввиду конечности высоты барьера возникает эффект туннелирования. Для его компенсации требуется использовать барьер достаточной толщины. Вычислительный эксперимент показывает, что эта толщина зависит от параметра жесткости – отношения минимальных и максимальных значений импульсов в системе

$$k = \frac{p_{\max}}{p_{\min}}, \quad (7)$$

где $p_{\max}$ – максимальное и $p_{\min}$ – минимальное значение импульса, в свою очередь определяемое геометрическим размером системы. Следует отметить, что введенный параметр жесткости аналогичен данному параметру для систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

Аналитическое решение

Оценка точности численного решения требует построения эталонного решения и сравнения его с решением, полученным методом Фурье с разделенным шагом. Рассматриваемая нами модельная система состоит из прямоугольного бесконечного канала заданной ширины и волнового пакета, движущегося вдоль этого канала. Такая система выбрана ввиду ее близости к реальным наноструктурам,

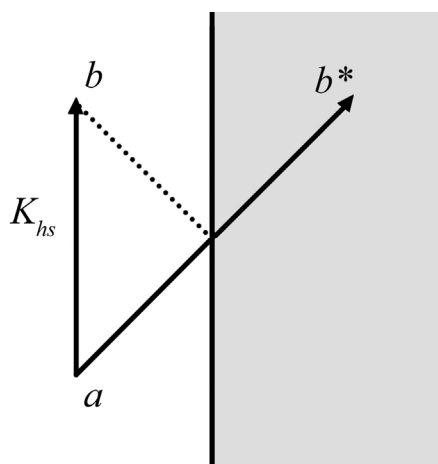


Рис. 1. Пропагатор в полупространстве

используемым для транспорта заряда в нанoeлектронике, и возможности построения аналитического решения уравнения Шрёдингера. С целью аналитического описания этой системы удобно использовать технику интегралов по траекториям [7]. Важным понятием в таком описании является пропагатор – амплитуда вероятности перехода из точки a в точку b за некоторое время. Пропагатор для свободной частицы задается выражением [7]

$$K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = \left(\frac{2\pi i \hbar b (t_b - t_a)}{m} \right)^{-1/2} \exp \left(\frac{im(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)^2}{2\hbar b (t_b - t_a)} \right).$$

В полупространстве (когда имеется бесконечный барьер вдоль оси $x=0$) пропагатор задается с помощью метода изображений [8]

$$K_{hs}(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) - K(\mathbf{r}_{b*}, t_{b*}; \mathbf{r}_a, t_a), \quad (8)$$

где x_{b*} – изображение x_b во втором полупространстве (рис. 1).

При применении формулы отражения (8) к каждой стенке канала нашей модельной системы пропагатор будет описан рядом

$$K_t(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) = K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) + I_L K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) + I_R K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) + \\ + I_L I_R K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) + I_R I_L K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) + \dots, \quad (9)$$

где I_R и I_L – формальные операторы, преобразующие пропагатор с конечной точкой b в пропагатор с конечной точкой b^* , являющейся изображением b в правой и левой стенках каналов соответственно (рис. 2). Для оценки точности численного метода определяется различие между модулями квадратов волновых функций – результатов численного и аналитического решений. Конечное состояние волновой функции можно выразить через пропагатор:

$$\psi(\mathbf{r}_b, t_b) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, t_a) \psi(\mathbf{r}_a, t_a) d\mathbf{r}_a. \quad (10)$$

При подстановке (9) в (10) получаем выражение, в котором затем меняем порядок суммирования и интегрирования:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_b, t_b) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{i=0}^{+\infty} K_t^i(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, 0) \right) \psi(\mathbf{r}_a) d\mathbf{r}_a = \\ &= \sum_{i=0}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} K_t^i(\mathbf{r}_b, t_b; \mathbf{r}_a, 0) \psi(\mathbf{r}_a) d\mathbf{r}_a. \end{aligned}$$

В результате имеем ряд, члены которого – хорошо известные [9] аналитические решения уравнения (1), описывающие распространение свободной частицы, в нашем случае – гауссова волнового пакета:

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(\frac{ip_x}{\hbar} x\right).$$

Таким образом, рассматриваемая система может быть описана суперпозицией пространственно-сдвинутых точных аналитических решений, сходящейся экспоненциально. В итоге легко можно получить искомое аналитическое решение с любой точностью.

Результаты и их обсуждение

Оценка точности была произведена для разного количества узлов сетки и при разных параметрах жесткости. За величину отклонения взята сумма разностей модулей квадратов волновых функций эталонного и численного решений. Численное моделирование осуществлялось на сетках размера 256×256 , 512×512 и 1024×1024 узлов. Следует использовать размеры сетки 2^n , так как производительность алгоритма быстрого фурье-преобразования в таких случаях максимальна [10]. Были изучены системы с жесткостью (7), равной 2, 4, 8 и 16. Результаты представлены в таблице. Легко заметить, что для расчета систем с большей жесткостью необходимо использовать более высокие разрешения сетки. Однако это не следует считать существенным ограничением метода, поскольку рассматриваемые системы обычно имеют узкий спектр характерных энергий. Для систем с широким энергетическим спектром метод оказывается неприменим. Так, в двумерном случае система растет с увеличением жесткости k как $O(k^2 \log^2 k)$. Дальнейшие исследования могут выявить подходы, позволяющие повысить максимально допустимую жесткость рассматриваемых систем.

Отклонение решения, полученного численным методом, от аналитического решения для различных значений жесткости системы и разрешения сетки, %

Размер сетки, узлы	Жесткость			
	2	4	8	16
256×256	2,45	4,84	7,12	10,3
512×512	1,94	3,12	5,01	8,12
1024×1024	0,71	1,12	1,18	4,55

* * *

Была разработана GRID-совместимая реализация метода Фурье с разделенным шагом с граничными условиями первого рода. Совместимость с гетерогенными вычислительными машинами обеспечена применением алгоритма предварительного распределения нагрузки. Точность разработанного алгоритма оценивалась путем сравнения с аналитическим решением, полученным с помощью интегралов по траекториям. Рассмотренный метод обладает хорошей точностью при расчетах систем с малой жесткостью.

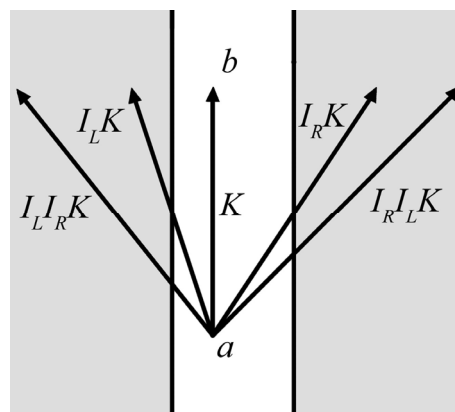


Рис. 2. Пропагатор в двумерном прямоугольном канале

1. Zoldi S., Ruban V., Zenchuk A., Burtsev S. // SIAM News. 2005. Vol. 32. № 1.
2. Watanabe N., Tsukada M. // Phys. Rev. 2005. E62. № 2. P. 2914.
3. Ciarlet P.G., Lions J.L. Handbook of Numerical Analysis. Vol. 01. Finite Difference Methods. Elsevier, 1998. P. 121.
4. Markiewicz D.W. Survey on Symplectic Integrators. Tech. rep. Berkley, 1999. P. 5.
5. Ciarlet P.G., Lions J.L. Handbook of Numerical Analysis. Vol. 06. Numerical Methods for Fluids. Elsevier, 1998.
6. Blackford L.S., Choi J., Cleary A. ScaLAPACK Users' Guide. Philadelphia, 1997. P. 17.
7. Feynman R.P., Hibbs A.R. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York, 1965. P. 55.
8. Andrews M. // Am. J. Phys. 1998. Vol. 66. P. 252.
9. Grosche C., Steiner F. Handbook of Feynman Path Integrals. Berlin, 1998. P. 174.
10. Frigo M., Johnson S.G. The Fastest Fourier Transform in the West. Tech. Rep. Cambridge, 1997. P. 4.

Поступила в редакцию 22.12.09.

Максим Александрович Белов – аспирант кафедры методики преподавания физики и информатики. Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры методики преподавания физики и информатики Г.Г. Крылов.