

Università degli Studi di Verona

DIPARTIMENTO DI INFORMATICA
Corso di Laurea in Matematica Applicata

TESI DI LAUREA

Simulazione in FreeFem++ della Dinamica di Vortici Quantistici

Candidato:

Giacomo Tabarelli

Matricola VR376740

Relatore:

Marco Caliarì

Indice

1	Introduzione	3
2	Il modello	4
3	Metodi numerici	8
4	Simulazioni numeriche	11
5	Il codice	18
6	Conclusioni	21

Listings

5.1	Definizione di $\rho(r)$ e di ψ per il singolo vortice nell'origine.	18
5.2	Definizione di $\rho(r)$ e di ψ per due vortici rispettivamente centrati in (-5	18
5.3	Costruzione della griglia circolare con corona circolare inscritta. .	18
5.4	Definizione dei bordi e costruzione della griglia rettangolare. . . .	18
5.5	Definizione dello spazio complesso V_h con elementi lineari (P1) e definizione delle varie variabili.	19
5.6	Definizione del problema e fattorizzazione della matrice per otti- mizzare il tempo di esecuzione.	19
5.7	Strang Splitting	19
5.8	Calcolo del tempo di esecuzione con il comando <i>clock()</i>	20

Capitolo 1

Introduzione

Negli ultimi cinquant'anni il metodo degli elementi finiti (Finite Elements Method) nasce dalla necessità di risolvere problemi strutturali e di elasticità in ambito civile ed aeronautico. Furono molti i pionieri di questo metodo ma tutti condividono una caratteristica fondamentale: la discretizzazione di un dominio continuo in un insieme discreto di sotto-domini chiamati appunto elementi.

In questo elaborato ci si occupa di descrivere l'applicazione del metodo ad un'equazione di Schrödinger non lineare per studiare la dinamica di vortici quantistici. L'equazione di Gross-Pitaevskii fornisce una precisa descrizione dei condensati atomici e delle loro dinamiche a basse temperature.

Nel Capitolo 2 viene presentata l'equazione di Gross-Pitaevskii e il modello matematico utilizzato. In seguito viene ricavata la forma adimensionale dell'equazione che è quella che verrà usata nelle simulazioni. Infine viene cercata una soluzione dell'equazione di Gross-Pitaevskii che rappresenti un vortice dritto centrato nell'origine e per far ciò viene introdotta l'approssimazione di Padé.

Nel Capitolo 3 vengono descritti i metodi numerici impiegati per integrare l'equazione di Gross-Pitaevskii in un dominio nel caso bidimensionale. È stato utilizzato il “time-splitting”, che consiste nella suddivisione dell'equazione interessata in due fasi temporali a cui segue il calcolo delle soluzioni delle due parti. Viene poi mostrata la conservazione della massa. La soluzione dell'equazione di partenza è stata trovata attraverso lo Strang splitting.

Nel Capitolo 4 vengono spiegati nel dettaglio i metodi utilizzati nelle simulazioni numeriche e vengono riportati i risultati ottenuti. Lo studio è stato effettuato inizialmente con un singolo vortice, in un secondo momento con più vortici orientati nella medesima direzione e non.

Nel Capitolo 5 vengono illustrate delle righe di codice FreeFem++ dove si sono riscontrate delle difficoltà, poi superate, di implementazione del metodo.

Capitolo 2

Il modello

Uno dei modelli più efficaci per descrivere il comportamento dell'elio superfluido a temperatura zero è fornito dall'equazione di Schrödinger non lineare per la funzione d'onda Ψ della singola particella. A temperatura zero l'elio-4 può essere descritto in termini di un gas di Bose debolmente interagente. Le equazioni che useremo vengono solitamente ideate assumendo che un condensato di Bose fornisca l'esatta rappresentazione a temperatura zero.

Un condensato di Bose imperfetto nell'approssimazione di Hartree è governato da equazioni che vennero derivate da Ginsburg, Pitaevskii e Gross. L'equazione per la funzione d'onda $\Psi(x, t)$ della singola particella macroscopica per N bosoni di massa m in posizione x al tempo t , è data da

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \Psi \int_{R^3} |\Psi(x', t)|^2 V(|x - x'|) dx', \quad (2.1)$$

dove $V(|x - x'|)$ è il potenziale d'interazione tra bosoni e $\hbar = h/(2\pi)$ (costante di Plank ridotta). La condizione di normalizzazione è

$$\int_{R^3} |\Psi|^2 dx = N.$$

Se usassimo $\Psi' = \Psi/\sqrt{N}$ allora

$$\int_{R^3} |\Psi'|^2 dx = 1.$$

e $|\Psi'(x, t)|$ potrebbe essere interpretato come la densità di probabilità di trovare un bosone in x al tempo t . Per un sistema di Bose debolmente interagente, l'equazione (2.1) si semplifica sostituendo $V(|x - x'|)$ con una funzione δ di forza V_0 [1]. L'equazione (2.1) risulta quindi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \Psi |\Psi|^2 V_0. \quad (2.2)$$

Lo stato iniziale è un condensato ovunque a riposo in quello che verrà chiamato “riferimento di laboratorio”, cioè $\Psi = \exp(iE_0/\hbar)$ [1], dove E_0 è il potenziale

chimico di un bosone (cioè l'aumento di energia dello stato fondamentale quando un bosone viene aggiunto al sistema). Consideriamo le deviazioni da questo stato studiando l'evoluzione di ψ , dove

$$\psi = \Psi \exp(iE_0/\hbar).$$

In questo modo l'equazione (2.2) diventa

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \psi |\psi|^2 V_0 - E_0 \psi. \quad (2.3)$$

La forma adimensionale dell'equazione (2.3) si ottiene rinormalizzando e applicando la trasformazione

$$x \rightarrow \frac{\hbar}{\sqrt{2mE_0}} x, \quad t \rightarrow \frac{\hbar}{2E_0} t, \quad \psi \rightarrow \psi_\infty \psi$$

dove $\psi_\infty = \sqrt{E_0/V_0}$ è la soluzione uniforme a riposo in un dominio infinito.

L'equazione (2.3) diventa

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{2} \nabla^2 \psi + \frac{i}{2} (1 - |\psi|^2) \psi, \quad (2.4)$$

con $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |\psi| = 1$, a cui corrisponde l'energia [3]

$$E = \int dV \left(\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + \frac{1}{4} (1 - |\psi|^2)^2 \right). \quad (2.5)$$

Cerchiamo una soluzione dell'equazione (2.4) che rappresenti un vortice dritto centrato nell'origine. Siccome su tutti i piani il vortice si comporta allo stesso modo, decidiamo di studiarlo su un unico piano e quindi da ora in poi parliamo di vortice bidimensionale.

È noto che il classico vortice bidimensionale di Eulero, di circolazione Γ , ha velocità azimutale $u_\theta = \Gamma/(2\pi)$, dove $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ è il raggio e $\theta = \arctan(y/x)$ è l'angolo azimutale. Le componenti cartesiane della velocità sono

$$u_x = -u_\theta \sin(\theta) = -\Gamma y/(2\pi r^2), \quad u_y = u_\theta \cos(\theta) = \Gamma x/(2\pi r^2).$$

Quindi $u = (u_x, u_y) = (\Gamma/(2\pi)) \nabla \theta$. Ciò dimostra che il campo di velocità è solenoidale ($\nabla \cdot u = 0$), che la fase della meccanica quantistica S è semplicemente l'angolo azimutale θ e che la circolazione quantistica, nelle nostre unità adimensionali, è pari a 2π .

In condizioni stazionarie la continuità dell'equazione assicura che $\nabla(\rho u) = 0$, quindi $u \cdot \nabla \rho = 0$, il che significa che $\nabla \rho \cdot \nabla \theta = 0$. La soluzione $\rho = 1$ deve essere esclusa perché ha energia infinita. Infatti se consideriamo $\psi = \rho e^{i\theta} = e^{i\theta}$, calcoliamo

$$|\psi|^2 = \nabla \psi \cdot \nabla \bar{\psi} = |\theta|^2 = \frac{1}{r^2},$$

e sostituiamo nell'equazione (2.5), attraverso un cambio di variabili otteniamo

$$E = \int_0^{+\infty} \frac{1}{2r^2} + \frac{1}{4}(1 - |e^{i\theta}|^2)^2 dx dy = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \frac{1}{r} dr d\theta = \pi [\ln r]_0^{+\infty} = +\infty.$$

L'altra possibilità è che $\nabla \rho \perp \nabla \theta$. Il gradiente in coordinate cilindriche si scrive

$$\nabla f(r, \theta) = \frac{\partial f(r, \theta)}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial f(r, \theta)}{\partial \theta} \hat{\theta}.$$

Siccome

$$\nabla \theta = \frac{1}{r} \hat{\theta},$$

$\nabla \rho$ deve essere parallelo a \hat{r} , da cui

$$\frac{\partial \rho}{\partial \theta} = 0.$$

Pertanto, per un campo di velocità stazionario, bidimensionale e con divergenza nulla, dobbiamo avere $\rho = \rho(r)$.

Cerchiamo una soluzione che rappresenti un vortice centrato nell'origine, imponiamo $\psi = \sqrt{\rho} e^{iS} = f(r) e^{i\theta}$ [3], dove $f(r)$ è da determinare. Imponendo che ψ sia soluzione dell'equazione (2.4), troviamo che $f(r)$ soddisfa

$$f'' + \frac{f'}{r} + f \left(1 - f^2 - \frac{1}{r^2} \right) = 0, \quad (2.6)$$

con condizioni al bordo $f(0) = 0$ e $f(\infty) = 1$.

Per piccoli r , la soluzione può essere approssimata asintoticamente da $R(r) \sim \sum_{i=1}^{\infty} p_i r^{2i-1}$ e la serie risultante è utile soltanto nel suo raggio di convergenza. La soluzione asintotica ma divergente all'infinito può essere ricavata da $R(r) \sim \sum_{i=1}^{\infty} q_i r^{-2i}$ [2]. In vista dell'espansione in potenze dispari in zero e dell'espansione in potenze all'infinito, si può ottenere un'approssimazione di Padé del vortice dritto

$$\rho(r) \approx R(r)^2 = \frac{r^2(a_1 + a_2 r^2 + a_3 r^4 + \dots + a_n r^{2(n-1)})}{1 + b_1 r^2 + b_2 r^4 + b_3 r^6 + \dots + b_{n-1} r^{2(n-1)} + a_n r^{2n}}. \quad (2.7)$$

In alcuni articoli, ad esempio in [2], l'approssimazione (2.6) è limitata a

$$\rho(r) \approx R(r)^2 = \frac{r^2(a_1 + a_2 r^2)}{1 + b_1 r^2 + a_2 r^4}. \quad (2.8)$$

Sostituendo l'equazione (2.8) nell'equazione (2.6) ed espandendo le espressioni risultanti in serie di r , ponendo i primi coefficienti di uguali potenze uguali a zero, si ottiene

$$a_1 = \frac{11}{32}, \quad b_1 = \frac{5 - 32a_1}{48 - 192a_1}, \quad a_2 = a_1 \left(b_1 - \frac{1}{4} \right). \quad (2.9)$$

La forma (2.9) non è tuttavia ottimale. Se si calcola $\rho(r)'$, si scopre che si annulla nelle radici di

$$r^4(a_2b_1 - a_1a_2) + 2r^2a_2 + a_1,$$

due delle quali risultano puramente immaginarie, una reale negativa e una reale positiva. Si prende in considerazione la sola radice reale positiva, a cui corrisponde il massimo di $\rho(r)$

$$r_1 = \sqrt{96 + 75\sqrt{2}}$$

e si sostituisce tale radice in (2.8), ottenendo

$$\rho(r_1) \approx 1.000893.$$

Il valore trovato è maggiore di 1 e ciò dimostra che l'approssimazione di $\rho(r)$ ottenuta dell'espressione (2.8) con i parametri in (2.9) tende a 1 dall'alto. Una migliore approssimazione si otterrebbe considerando un termine in più al numeratore e al denominatore di (2.8).

Per darci un'idea di com'è fatta ψ , la illustriamo di seguito mostrando la densità del vortice $|\psi|^2$ e la fase $\arg(\psi)$. Si noti che nella figura di sinistra θ è uguale ad $\text{atan2}(y, x)$ e non $\text{atan}(y/x)$, questo per questioni di continuità sul dominio.

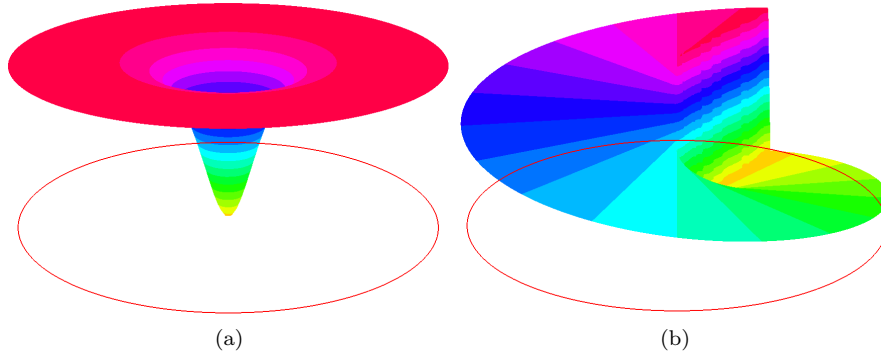


Figura 2.1: Vista in 3D della densità del vortice $\sqrt{\rho(r)}$ (a) e della fase del vortice $e^{i\theta}$ (b).

Capitolo 3

Metodi numerici

Descriviamo il metodo numerico applicato al caso bidimensionale non avendo particolari applicazioni nel caso unidimensionale. Innanzitutto utilizziamo il metodo di time-splitting dividendo l'equazione in due fasi temporali, in modo da separare l'operatore lineare dal non lineare

$$\psi_t = \frac{i}{2} \nabla^2 \psi, \quad (3.1)$$

$$\psi_t = \frac{i}{2} (1 - |\psi|^2) \psi, \quad (3.2)$$

dove il pedice t indica la derivata temporale.

Per l'equazione (3.1) utilizziamo il metodo di Crank-Nicolson (o metodo dei trapezi) applicato alla forma debole (3.3) come vuole il FEM ed essendo su uno spazio con elementi in 2D

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \psi}{\partial t} \bar{v} = \frac{i}{2} \int_{\Omega} \nabla^2 \psi \bar{v} \quad (3.3)$$

discretizziamo rispetto al tempo

$$\int_{\Omega} \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} \bar{v} = \frac{i}{2} \int_{\Omega} \frac{\nabla^2 \psi^{n+1} + \nabla^2 \psi^n}{2} \bar{v}. \quad (3.4)$$

Osserviamo che

$$\nabla(\nabla \psi \bar{v}) = \nabla^2 \psi \bar{v} + \nabla \psi \nabla \bar{v},$$

quindi membro di destra di (3.3) diventa

$$\frac{i}{2} \int_{\Omega} \nabla^2 \psi \bar{v} = \frac{i}{2} \int_{\Omega} \nabla(\nabla \psi \bar{v}) - \frac{i}{2} \int_{\Omega} \nabla \psi \nabla \bar{v}.$$

Applicando il Teorema della Divergenza sul primo integrale di destra e considerando le condizioni al bordo di Neumann omogenee otteniamo

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla^2 \psi \bar{v} &= \int_{\Gamma} \nabla \psi \bar{v} \vec{n} - \int_{\Omega} \nabla \psi \nabla \bar{v}, \\ \nabla \psi|_{\Gamma} = 0 \quad \rightarrow \quad \int_{\Gamma} \nabla \psi \bar{v} \vec{n} &= 0 \quad \rightarrow \quad \int_{\Omega} \nabla^2 \psi \bar{v} = - \int_{\Omega} \nabla \psi \nabla \bar{v}, \end{aligned}$$

dove $\Gamma = \partial\Omega$. Sostituendo ora in (3.4) otteniamo

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} \bar{v} &= \frac{i}{2} \int_{\Omega} \frac{-\nabla \psi^{n+1} \nabla \bar{v} - \nabla \psi^n \nabla \bar{v}}{2} \\ \int_{\Omega} \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} \bar{v} + \frac{i}{4} (\nabla \psi^{n+1} + \nabla \psi^n) \nabla \bar{v} &= 0. \\ \int_{\Omega} \frac{\psi^{n+1}}{\Delta t} \bar{v} + \frac{i}{4} \nabla \psi^{n+1} \nabla \bar{v} &= \int_{\Omega} \frac{\psi^n}{\Delta t} \bar{v} - \frac{i}{4} \nabla \psi^n \nabla \bar{v}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Ora con l'utilizzo di elementi finiti lineari si arriva a

$$\psi_{n+1} = \psi_n + \frac{\Delta t}{2} [M \psi_{n+1} + M \psi_n] \quad (3.6)$$

Poichè la matrice di rigidezza M del problema 3.5 è anti-hermitiana, cioè vale la proprietà $M^H = -M$, possiamo dimostrare che il metodo di Crank-Nicolson conserva la massa totale $m(t)$

$$m(t) = \|\psi(t)\|_{L^2}^2 = \int_{\Omega} \overline{\psi(x, y, t)} \psi(x, y, t), \quad (3.7)$$

sappiamo che lo schema iterativo è quello di (3.6) da cui possiamo ricavare

$$\psi_{n+1} = (I - \frac{\Delta t}{2} M)^{-1} (I + \frac{\Delta t}{2} M) \psi_n,$$

ora basta scrivere il prodotto nell'integrale (3.7) come

$$\begin{aligned} \overline{\psi_{n+1}} \psi_{n+1} &= \overline{\psi_n} (I + \frac{\Delta t}{2} M)^H (I - \frac{\Delta t}{2} M)^{-H} (I - \frac{\Delta t}{2} M)^{-1} (I + \frac{\Delta t}{2} M) \psi_n \\ &= \overline{\psi_n} (I - \frac{\Delta t}{2} M) (I + \frac{\Delta t}{2} M)^{-1} (I - \frac{\Delta t}{2} M)^{-1} (I + \frac{\Delta t}{2} M) \psi_n \\ &= \overline{\psi_n} (I - \frac{\Delta t}{2} M)^{-1} (I - \frac{\Delta t}{2} M) (I + \frac{\Delta t}{2} M)^{-1} (I + \frac{\Delta t}{2} M) \psi_n \\ &= \overline{\psi_n} \psi_n = \overline{\psi_0} \psi_0. \end{aligned}$$

questo perché polinomi della stessa matrice commutano, quindi è uguale al prodotto della condizione iniziale, si conserva nel tempo e, di conseguenza, anche la massa $m(t)$ è costante nel tempo.

Anche la seconda parte dello schema di time-splitting conserva la massa. Questo si può facilmente dimostrare prendendo il coniugato dell'equazione (3.2)

$$\psi_t = \frac{i}{2}(1 - |\psi|^2)\psi, \quad \overline{\psi}_t = -\frac{i}{2}(1 - |\psi|^2)\overline{\psi},$$

quindi la derivata di $|\psi|^2$ rispetto al tempo è

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = \frac{\partial \psi \overline{\psi}}{\partial t} = \psi_t \overline{\psi} + \psi \overline{\psi}_t = \frac{i}{2}(1 - |\psi|^2)\psi \overline{\psi} + \psi \left[-\frac{i}{2}(1 - |\psi|^2)\overline{\psi} \right] = 0.$$

Quindi $|\psi|^2$ non dipende dal tempo e questo è cruciale perché implica che la soluzione dell'equazione (3.2) è semplicemente

$$\psi(x, y, t) = e^{t \frac{i}{2}(1 - |\psi(x, y, 0)|^2)} \psi(x, y, 0). \quad (3.8)$$

Al fine di illustrare l'algoritmo numerico è conveniente formulare l'equazione differenziale parziale come un'equazione differenziale ordinaria, eliminando la dipendenza dallo spazio e sostituendo $\psi(x, y, t)$ con $u(t)$. In questo modo otteniamo il problema ai valori iniziali

$$u'(t) = [A + B(u(t))]u(t), \quad u(t_0) = u_0, \quad (3.9)$$

nel nostro caso

$$A = \frac{i}{2} \nabla^2$$

$$B(u(t)) = \frac{i}{2}(1 - |u(t)|^2).$$

A questo punto abbiamo a disposizione due tipi di time-splitting, Lie e Strang, rispettivamente del primo e del secondo ordine. La soluzione può essere determinata ricorsivamente da Lie-splitting

$$u^{n+1} = e^{\Delta t A} e^{\Delta t B(u^n)} u^n \quad (3.10)$$

o da Strang-splitting con

$$U^{n+1} = e^{\Delta t A} e^{\frac{\Delta t}{2} B(u^n)} u^n, \quad u^{n+1} = e^{\frac{\Delta t}{2} B(U^{n+1})} U^{n+1}. \quad (3.11)$$

Capitolo 4

Simulazioni numeriche

In questo capitolo ci occuperemo di illustrare le simulazioni del nostro modello. Inizialmente per semplicità la simulazione è stata condotta per un singolo vortice, successivamente il codice è stato adattato per la simulazione di due e più vortici orientati nella stessa direzione e non. Le varie modifiche verranno descritte in seguito.

La condizione iniziale del singolo vortice è stata ottenuta come descritto nei capitoli precedenti. Successivamente è stato applicato il metodo di Strang-splitting seguendo i passaggi dell'algoritmo descritto nel capitolo 3. Per la visualizzazione della soluzione sono stati calcolati il modulo al quadrato $|\psi|^2$ e l'argomento $\arg(\psi)$. Si è notato, nel caso del singolo vortice, che la soluzione essendo stazionaria rimane nella stessa posizione.

Si è poi deciso di complicare la condizione iniziale aggiungendo ulteriori vortici con stessa orientazione e non. Prima di tutto sono stati traslati dall'origine modificando l'espressione del raggio

$$r_i^2 = (x - x_i)^2 + (y - y_i)^2, \quad i = 1, \dots, n,$$

poi sono stati calcolati i ρ_i con la stessa formula utilizzata per il singolo vortice, mentre gli S_i sono stati calcolati

$$S_i = \arctan\left(\frac{y - y_i}{x - x_i}\right), \quad i = 1, \dots, n.$$

Infine, dopo aver calcolato tutte le ψ_i condizioni iniziali, è stato possibile definire la nuova condizione iniziale comprendente di tutti i vortici calcolati in precedenza

$$\psi_0 = \psi_1 \cdot \psi_2 \cdot \dots \cdot \psi_n = \prod_i \psi_i, \quad i = 1, \dots, n$$

ed analizzarla nello stesso modo del singolo vortice, usando il metodo di Strang-splitting per trovare la soluzione al tempo T .

In particolare abbiamo osservato che cambiando la rotazione dei vortici questi si comportano in maniera differente. Avendo la stessa rotazione si osserva

una rotazione dell'intera condizione iniziale, mentre avendo rotazioni opposte si osserva una traslazione di ψ_0 . Per questo motivo abbiamo deciso di utilizzare spazi diversi a seconda del comportamento della soluzione in modo da osservarne al meglio i cambiamenti al variare del tempo, in secondo fine per ottimizzare la simulazione. Inizialmente abbiamo usato spazi divisi in elementi di uguale dimensione, si vedano figure 4.9 e 4.10. Successivamente, per osservare meglio la soluzione e ottimizzare il tempo di simulazione, è stato scelto di usare spazi adattati al comportamento di ψ : nel caso della rotazione abbiamo usato una corona circolare, mentre nella traslazione dei rettangoli. Si vedano figure 4.11 e 4.12.

Simulando il singolo vortice non abbiamo osservato cambiamenti significativi.

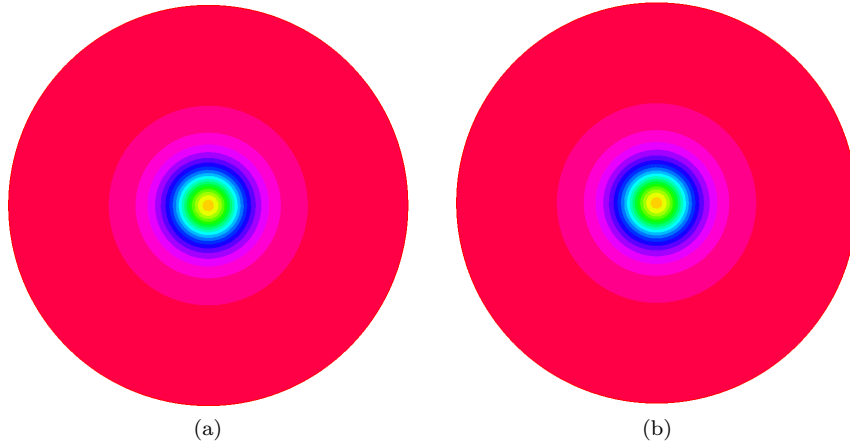


Figura 4.1: $|\psi|^2$ al tempo $T = 0$ (a) e al tempo $T = 60$ (b) con $dt = 0.01625$ con spazio in figura 4.9.

Nell'immagine 4.3 i vortici sono stati centrati rispettivamente nei punti $P_1(-5, 0)$ e $P_2(5, 0)$, con stessa rotazione antioraria. Si può osservare come la condizione iniziale ψ_0 abbia ruotato di $\pi/2$ al tempo $T = 65$, di π a $T = 130$ e di $2\pi/3$ a $T = 195$. Tutte le simulazioni, fino ai vari tempi finali, sono state fatte con un passo temporale $dt = 0.01625$.

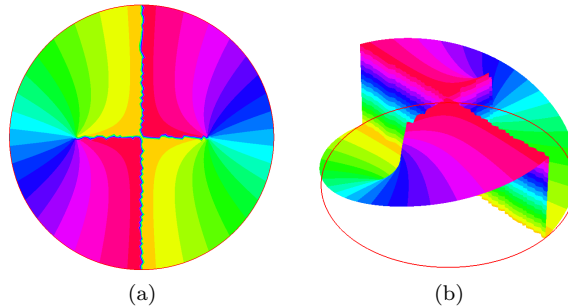


Figura 4.2: Ritratto di fase di ψ_0 al tempo $T = 0$.

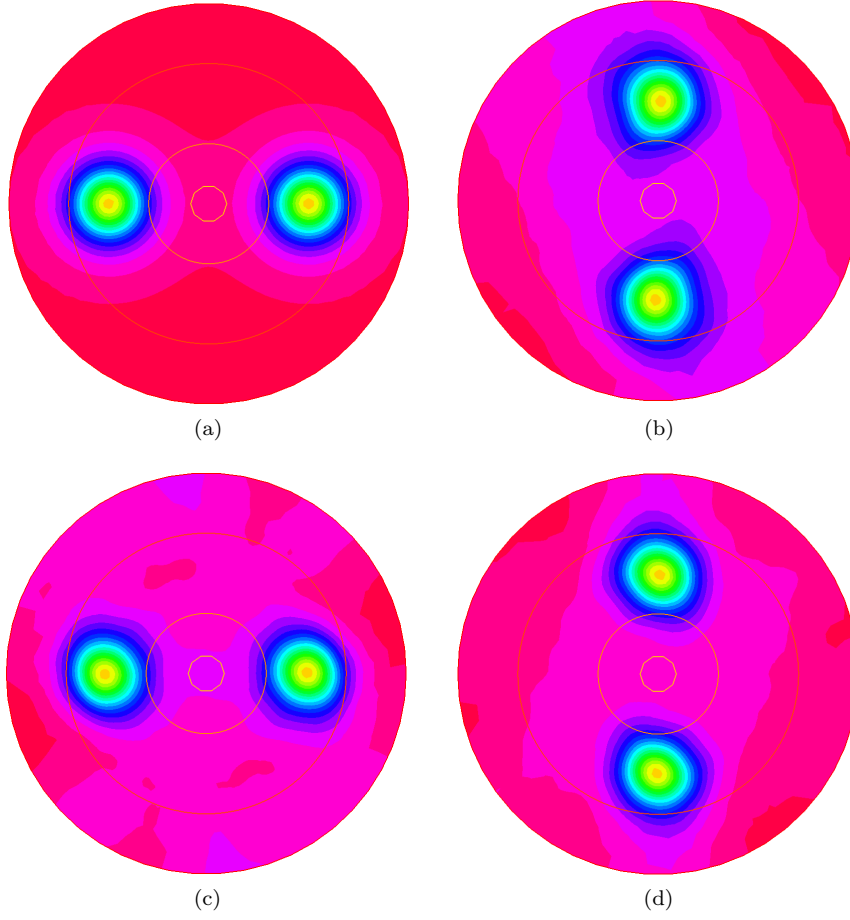


Figura 4.3: $|\psi|^2$ con due vortici centrati in $P_1(-5,0)$ e $P_2(5,0)$, al tempo $T = 0$ (a), al tempo $T = 65$ (b), al tempo $T = 130$ (c) e al tempo $T = 195$ (d).

Si è notato, spostando i vortici ed effettuando le varie prove, che la velocità di rotazione di ψ_0 dipende dalla distanza a cui i vortici si trovano. In particolare più sono vicini più la soluzione iniziale ruota velocemente, al contrario più si trovano distanti e più ψ_0 è lenta nella rotazione.

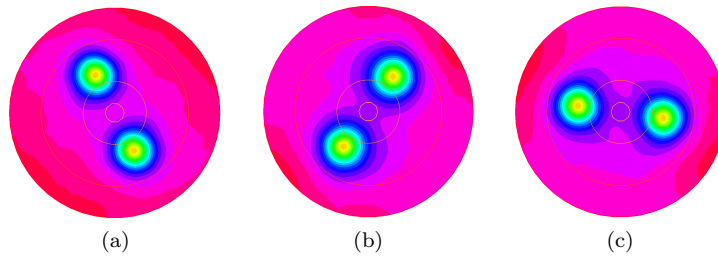


Figura 4.4: Differenza di velocità di due vortici centrati in $P_3(-4,0)$ e $P_4(4,0)$ al tempo $T = 65$ (a), al tempo $T = 130$ (b) e al tempo $T = 195$ (c).

Nell'immagine 4.5 i vortici ruotano in senso opposto e si nota facilmente come la condizione iniziale ψ_0 abbia traslato nel tempo. Anche in questa simulazione é stato usato un passo temporale $dt = 0.01625$.

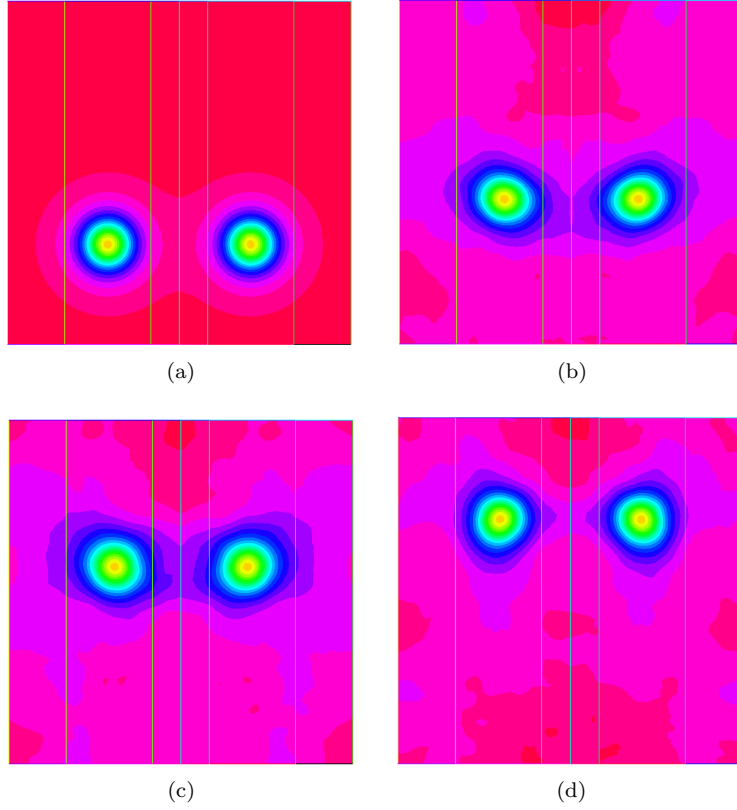


Figura 4.5: $|\psi|^2$ con due vortici centrati in $P_5(-5, -5)$ e $P_6(5, -5)$ con rotazione rispettivamente antioraria ed oraria, al tempo $T = 0$ (a), al tempo $T = 65$ (b), al tempo $T = 130$ (c) e al tempo $T = 195$ (d).

Anche nel fenomeno della traslazione si può osservare come ψ_0 subisca una variazione di velocità dipendente dalla distanza dei due vortici.

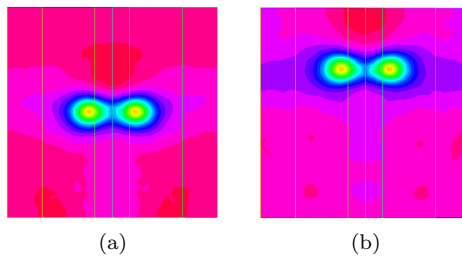


Figura 4.6: Vortici centrati in $P_7(-3, -5)$ e $P_8(-3, 5)$, molto più veloci al tempo $T = 32,5$ (a) e al tempo $T = 65$ (b).

A questo punto abbiamo deciso di analizzare il tempo di esecuzione del programma per vedere eventuali vantaggi e svantaggi dell'utilizzo di spazi suddivisi in modo diverso. FreeFem++ mette a disposizione una funzione apposita per tenere memorizzato il tempo, basta utilizzare il comando `clock()` che restituisce un valore in secondi. Inoltre per velocizzare ulteriormente le simulazioni abbiamo fattorizzato la matrice di rigidità tramite una funzione di FreeFem++ che fornisce anche la possibilità di scegliere il solver. Illustriamo di seguito i tempi delle simulazioni nelle tre casistiche: spazio suddiviso uniformemente e senza fattorizzazione della matrice; spazio suddiviso in maniera efficiente e senza fattorizzazione ed infine spazio suddiviso in maniera efficiente e con fattorizzazione.

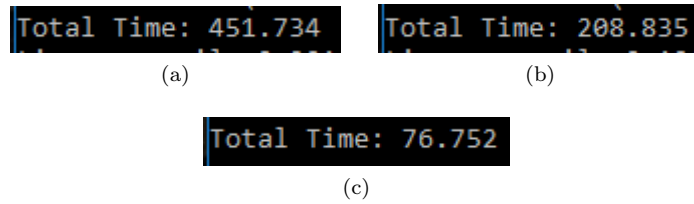


Figura 4.7: Tempo di esecuzione con rotazione di ψ_0 a $T = 32.5$ con spazio come in figura 4.9 (a), con spazio come in figura 4.11 (b) e con fattorizzazione della matrice (c).

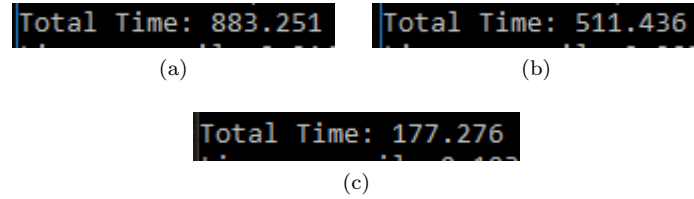


Figura 4.8: Tempo di esecuzione con traslazione di ψ_0 a $T = 32.5$ con spazio come in figura 4.10 (a), con spazio come in figura 4.12 (b) e con fattorizzazione della matrice (c).

Come si può notare si guadagna molto in termini di tempo sia usando spazi divisi in maniera efficiente e ancora di più fattorizzando la matrice in modo che ad ogni passo temporale vi sia solo da risolvere sistemi lineari banali. I tempi della traslazione sono molto più alti essendo che lo spazio in figura 4.12 ha molti più elementi dello spazio in figura 4.11.

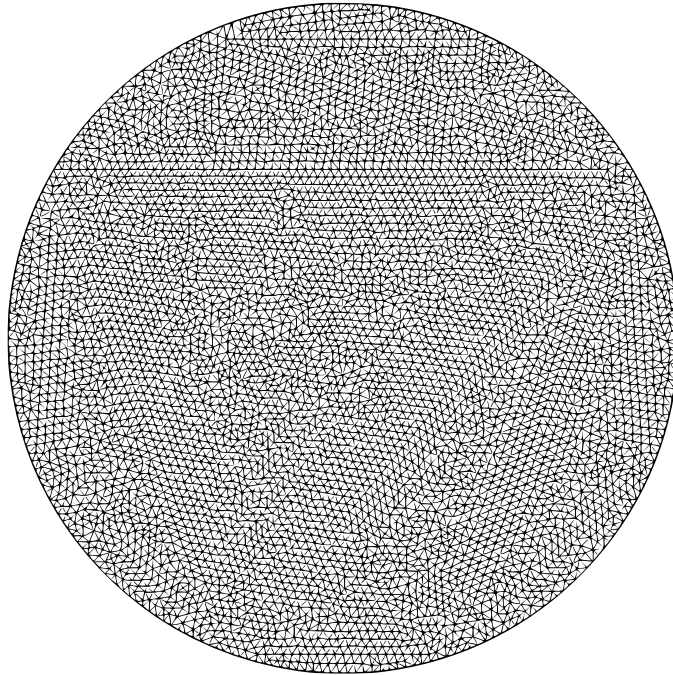


Figura 4.9: Spazio con sola circonferenza di raggio $r = 10$ divisa in elementi uguali, 250 punti sulla circonferenza, 10926 triangoli (elementi) e 5589 vertici.

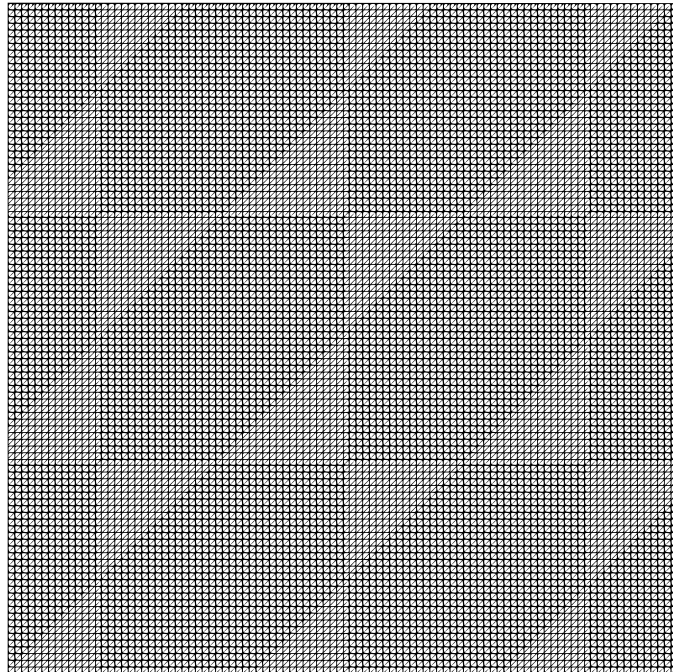


Figura 4.10: Spazio con solo quadrato di lato $l = 12$ diviso in elementi uguali, 100 punti su ogni lato, 20000 triangoli (elementi) e 10201 vertici.

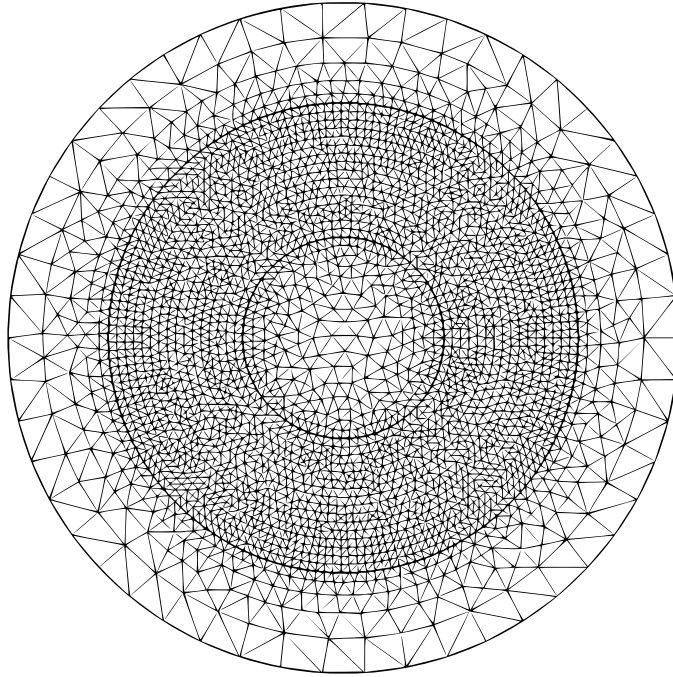


Figura 4.11: Spazio con corona circolare inscritta in una circonferenza di raggio $r = 10$, 5690 triangoli (elementi) e 2871 vertici.

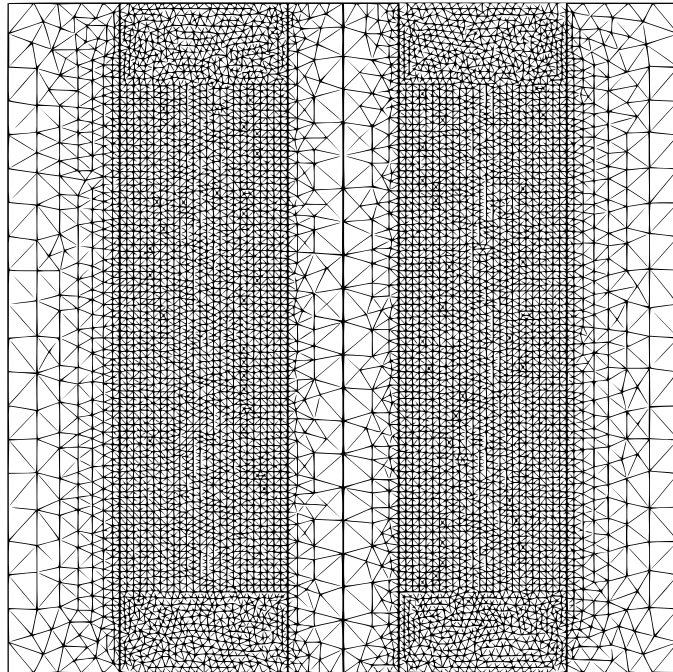


Figura 4.12: Spazio con lato $l = 12$, con elementi più fitti lungo due rettangoli, 12334 triangoli (elementi) e 6248 vertici.

Capitolo 5

Il codice

Riportiamo di seguito vari pezzi di codice FreeFem++

```
func ro = (x^2+y^2)*(a1
          +a2*(x^2+y^2))/(1+b1*(x^2+y^2)+a2*(x^2+y^2)^2);
func psi = sqrt(ro)*exp(1i*atan2(y,x));
```

Listing 5.1: Definizione di $\rho(r)$ e di ψ per il singolo vortice nell'origine.

```
func ro = ((x-5)^2+(y)^2)*(a1
          +a2*((x-5)^2+(y)^2))/(1+b1*((x-5)^2+(y)^2)
          +a2*((x-5)^2+(y)^2)^2)*((x+3)^2+(y)^2)*(a1
          +a2*((x+5)^2+(y)^2))/(1+b1*((x+5)^2+(y)^2)
          +a2*((x+5)^2+(y)^2)^2);
func psi = sqrt(ro)*exp(1i*atan2(y,x-5))
          *exp(1i*atan2(y,x+5));
```

Listing 5.2: Definizione di $\rho(r)$ e di ψ per due vortici rispettivamente centrati in $(-5, 0)$ e $(5, 0)$.

```
border Circle1 (t=0,2*pi){x=R*cos(t); y=R*sin(t);}
border Circle2 (t=0,2*pi){x=7*cos(t); y=7*sin(t);}
border Circle3 (t=0,2*pi){x=3*cos(t); y=3*sin(t);}
border Circle4 (t=0,2*pi){x=cos(t); y=sin(t);}
```

```
mesh grid = buildmesh(Circle1(50)+Circle2(150)
                      +Circle3(75)+Circle4(10));
```

Listing 5.3: Costruzione della griglia circolare con corona circolare inscritta.

```
border Left1 (t=0,1){x=-12; y=12-24*t;}
border Left2 (t=0,1){x=-8; y=12-24*t;}
border Left3 (t=0,1){x=-2; y=12-24*t;}
border Right1 (t=0,1){x=12; y=-12+24*t;}
border Right2 (t=0,1){x=8; y=-12+24*t;}
border Right3 (t=0,1){x=2; y=-12+24*t;}
border Center (t=0,1){x=0; y=-12+24*t;}
```

```

border Up1(t=0,1){x=12-4*t; y=12;}
border Up2(t=0,1){x=8-6*t; y=12;}
border Up3(t=0,1){x=2-2*t; y=12;}
border Up4(t=0,1){x=-2*t; y=12;}
border Up5(t=0,1){x=-2-6*t; y=12;}
border Up6(t=0,1){x=-8-4*t; y=12;}
border Down1(t=0,1){x=-12+4*t; y=-12;}
border Down2(t=0,1){x=-8+6*t; y=-12;}
border Down3(t=0,1){x=-2+2*t; y=-12;}
border Down4(t=0,1){x=2*t; y=-12;}
border Down5(t=0,1){x=2+6*t; y=-12;}
border Down6(t=0,1){x=8+4*t; y=-12;}

mesh grid = buildmesh(Up1(5)+Up2(20)+Up3(5)+Up4(5)
+Up5(20)+Up6(5)+Right1(20)+Right2(100)
+Right3(100)+Center(20)+Down1(5)+Down2(20)+Down3(5)
+Down4(5)+Down5(20)+Down6(5)+Left1(20)+Left2(100)
+Left3(100));

```

Listing 5.4: Definizione dei bordi e costruzione della griglia rettangolare.

```

fespace Vh(grid, P1);
Vh<complex> uT=u0, vt, uoT, absuT;

```

Listing 5.5: Definizione dello spazio complesso Vh con elementi lineari (P1) e definizione delle varie variabili.

```

//Problem with Crank-Nicolson + factorization
varf thermic(uT, vt) = int2d(grid) (uT/dt*conj(vt))
+int2d(grid) (0.25*1i*Grad(vt)'*Grad(uT));
matrix<complex> A = thermic(Vh,Vh,solver=LU,factorize=1);

```

Listing 5.6: Definizione del problema e fattorizzazione della matrice per ottimizzare il tempo di esecuzione.

```

//Strang Splitting
//calcolo della parte non lineare attraverso i coefficienti
//mezzo passo
for(int i = 0; i < uT.n; i++)
    uoT[(i)] = exp(1i*dt/4*(1 - abs(uT[(i)])^2))*uT[(i)];

//calcolo della parte lineare, un passo
varf l(unused, vt) = int2d(grid) (0.25*1i*Grad(vt)'
*Grad(uoT)) - int2d(grid) (uoT/dt*conj(vt));
Vh<complex> b;
b[] = l(0, Vh);
uT[] = A^-1*b[];

//calcolo della parte non lineare attraverso i coefficienti
//mezzo passo
for(int i = 0; i < uT.n; i++)

```

```

    uoT [] ( i ) = exp ( 1 i * dt / 4 * ( 1 - abs ( uT [] ( i ) ) ^ 2 ) ) * uT [] ( i );
uT = uoT;

```

Listing 5.7: Strang Splitting

```

int  cpu = clock ();
for ( real  t = 0; t < T; t += dt )
{
    ...
    ...
    ...
}

cout << "Total Time: " << clock () - cpu << endl;

```

Listing 5.8: Calcolo del tempo di esecuzione con il comando *clock()*.

Capitolo 6

Conclusioni

L'obiettivo di questo elaborato è stato quello di studiare la dinamica di vortici quantistici, utilizzando il modello di Gross-Pitaevskii che è un'equazione di Schrödinger non lineare. Questa è stata poi trasformata nell'equazione adimensionale che poi abbiamo usato nelle simulazioni.

In un secondo momento è stata cercata una soluzione stazionaria dell'equazione e una soluzione numerica dipendente dal tempo. Nel primo caso è stata utilizzata un'approssimazione di Padè nota in letteratura, che nella forma esaminata non è risultata ottimale perché la densità supera il valore di 1, mentre dovrebbe valere al limite 1 all'infinito. In seguito l'equazione è stata risolta numericamente utilizzando i metodi di splitting e sono state eseguite simulazioni numeriche su un singolo vortice e su due vortici con la medesima orientazione e non. Tali risultati sono risultati efficaci per l'approssimazione della soluzione, che riproduce il comportamento fisico.

Infine, abbiamo acquisito dimestichezza nell'utilizzo di FreeFem++ per simulare fenomeni fisici di vario tipo.

Bibliografia

- [1] P. H. Roberts and N. G. Berloff, The Nonlinear Schrödinger Equation As a Model Of Superfluidity, in *Quantized Vortex Dynamics and Superfluid Turbulence*, Lecture Notes in Physics Vol. 571 (2001).
- [2] N. G. Berloff, *Padé approximations of solitary wave solutions of the Gross-Pitaevskii equation*, J. Phys. A 37, 1617 (2004).
- [3] S. Zuccher, M. Caliori, A. W. Baggaley and C. F. Barenghi, *Quantum vortex reconnection*, Physics of Fluids 24, 125108 (2012).
- [4] W. Bao and Y. Cai, Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation, in *Kinetic and Related Models* Vol. 6, (2013).