

Università degli Studi di Verona

DIPARTIMENTO DI INFORMATICA
Corso di Laurea in Matematica Applicata

TESI DI LAUREA

**Raffinamento uniforme locale
per la dinamica di strutture quantistiche**

Candidato:
Gianmaria Lucca
Matricola VR443450

Relatore:
Prof. Marco Caliri

Anno Accademico 2021–2022

Indice

Capitolo 1. Introduzione	1
Capitolo 2. Modello	3
Capitolo 3. Metodi numerici	7
3.1. Strang Splitting	7
3.2. LUMR	8
Capitolo 4. Simulazioni numeriche	13
Capitolo 5. Sviluppi futuri	21
Capitolo 6. Conclusioni	23
Bibliografia	25

CAPITOLO 1

Introduzione

In questo elaborato ci si occupa di descrivere l'applicazione del metodo LUMR (Local Uniform Method of Regridding, in italiano Metodo di raffinamento uniforme locale) ad un'equazione di Schrödinger non lineare per studiare la dinamica di vortici quantistici. L'equazione di Gross-Pitaevskii governa lo stato e la dinamica di un gas bosone ultra freddo (condensato di Bose-Einstein) sotto l'approssimazione di Hartree.

Nel Capitolo 2 viene presentata l'equazione di Gross-Pitaevskii e il modello utilizzato. Successivamente verrà ricavata la forma adimensionale dell'equazione, che utilizzeremo nelle simulazioni numeriche. Infine cercheremo una soluzione della forma adimensionale dell'equazione di Gross-Pitaevskii che rappresenti un vortice dritto e centrato nell'origine.

Nel Capitolo 3, considerato un dominio bidimensionale, vengono descritti i metodi numerici utilizzati per determinare la soluzione dell'equazione di Gross-Pitaevskii. Per la soluzione nel dominio di lavoro è stato utilizzato il “time splitting”, che si basa nella divisione dell'equazione in due fasi temporali a cui segue il calcolo della soluzione delle due parti. La soluzione dell'equazione nel dominio di lavoro è stata trovata tramite il metodo di Strang Splitting. Inoltre, per ottenere delle simulazioni più accurate riducendo il costo computazionale, viene applicato il metodo LUMR, basato sulla generazione di sottodomini indipendenti a partire dal dominio di lavoro e sulla risoluzione dell'equazione in esame sui suddetti sottodomini.

Nel Capitolo 4 vengono discussi i metodi utilizzati per le simulazioni numeriche e successivamente riportati i risultati. Le simulazioni sono basate su: un singolo vortice, due vortici orientati nella medesima direzione e due vortici orientati in direzioni opposte.

Nel Capitolo 5 vengono trattati alcuni possibili miglioramenti dell'algoritmo di risoluzione.

CAPITOLO 2

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: assumiamo 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 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

$$(1) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + \Psi \int_{R^3} |\Psi(x', t)|^2 V(|x - x'|) dx',$$

dove $V(|x - x'|)$ rappresenta il potenziale d'interazione fra bosoni e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ è la costante di Planck ridotta.

La condizione di normalizzazione risulta essere

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

Se considerassimo $\tilde{\Psi} = \Psi/\sqrt{N}$

$$\implies \int_{R^3} |\tilde{\Psi}|^2 dx = 1,$$

dove $|\tilde{\Psi}(x, t)|$ può rappresentare la densità di probabilità di trovare un bosone in posizione x al tempo t . Considerato un sistema di Bose debolmente interagente [1], si sostituisce nell'equazione per la funzione d'onda (1) il potenziale d'interazione $V(|x - x'|)$ con una funzione δ con forza V_0 .

L'equazione (1) diventa

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

Definiremo “riferimento di laboratorio” lo stato iniziale, che risulta essere un condensato ovunque a riposo, cioè

$$\Psi = e^{i \frac{E_0}{\hbar}},$$

dove E_0 è il potenziale chimico di un bosone [1]. Consideriamo ora le deviazioni dallo stato fondamentale del bosone studiando l'andamento della funzione

$$\psi = \Psi e^{i \frac{E_0}{\hbar}}.$$

Perciò l'equazione (2) risulta essere equivalente a

$$(3) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \psi |\psi|^2 V_0 - E_0 \psi.$$

Per ottenere la forma adimensionale dell'equazione (3), si applica la rinormalizzazione e le trasformazioni

$$x \rightarrow \frac{\hbar}{\sqrt{2mE_0}}x, \quad t \rightarrow \frac{\hbar}{2E_0}t, \quad \psi \rightarrow \sqrt{\frac{E_0}{V_0}}\psi.$$

L'equazione (3) diventa quindi

$$(4) \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{i}{2} \nabla^2 \psi + \frac{i}{2} (1 - |\psi|^2) \psi,$$

con $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |\psi(x, t)| = 1$, a cui corrisponde l'energia [2]

$$(5) \quad E = \int \left[\frac{1}{2} |\nabla \psi|^2 + \frac{1}{4} (1 - |\psi|^2)^2 \right] dV.$$

Cerchiamo ora una soluzione all'equazione (4) che rappresenti un vortice dritto centrato nell'origine. D'ora in poi parleremo esclusivamente di vortice bidimensionale studiandolo su un unico piano, in quanto il comportamento è il medesimo su ogni piano.

La soluzione che cercheremo è chiamata anche dark vortex (vortice nero), in quanto $|\psi|^2$ è nullo al centro e tende a 1 all'esterno del vortice.

Il vortice bidimensionale di Eulero, di circolazione Γ , ha velocità azimutale pari a $v_\theta = \frac{\Gamma}{2\pi r}$, con angolo azimutale $\theta = \text{atan2}\left(\frac{y}{x}\right)$ e raggio $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. In un sistema di riferimento cartesiano, le componenti della velocità sono

$$v_x = -v_\theta \sin \theta = -\frac{\Gamma y}{2\pi r^2}, \quad v_y = v_\theta \cos \theta = \frac{\Gamma x}{2\pi r^2},$$

$$\implies v = (v_x, v_y) = \frac{\Gamma}{2\pi} \nabla \theta.$$

Ciò indica che il campo di velocità v è solenoidale, $\nabla \cdot v = 0$: la fase della meccanica quantistica S è l'angolo θ e la circolazione quantistica è pari a 2π .

In condizioni di stazionarietà la continuità dell'equazione garantisce $\nabla(\rho v) = 0$, perciò

$$v \cdot \nabla \rho = 0 \implies \nabla \rho \cdot \nabla \theta = 0.$$

Ipotizziamo la soluzione $\rho = 1$. Allora, considerata $\psi = \rho e^{i\theta} = e^{i\theta}$, calcoliamo

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

sostituendo nell'equazione (5) e attraverso un cambio di variabili si ha che l'energia

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

Escludiamo quindi la soluzione $\rho = 1$, in quanto l'energia è infinita.

Il secondo caso possibile è che $\nabla \rho \perp \nabla \theta$. Il gradiente in coordinate cilindriche risulta essere

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

Siccome

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

si ha che

$$\nabla \rho \parallel \hat{r} \implies \frac{\partial \rho}{\partial \theta} = 0.$$

Perciò, per un campo di velocità bidimensionale, stazionario e a divergenza nulla si ha che $\rho = \rho(r)$.

Imponendo $\psi = \sqrt{\rho} e^{iS} = \sqrt{\rho(r)} e^{i\theta}$ [2], determiniamo una soluzione che rappresenti un vortice centrato nell'origine. Sostituendo l'equivalenza nell'equazione (4), ρ soddisfa

$$(6) \quad \rho'' + \frac{\rho'}{r} - \frac{\rho'^2}{2\rho} - \frac{2\rho}{r^2} + 2(1 - \rho)\rho = 0,$$

con condizioni al bordo $\rho(0) = 0$, $\rho(\infty) = 1$.

È risaputo [3] che l'approssimazione di Padé di $\rho(r)$ mantiene unicamente le potenze pari sia al numeratore che al denominatore, cioè

$$(7) \quad \rho(r) \approx \frac{a_0 + a_1 r^2 + a_2 r^4 + a_3 r^6 + \dots + a_p r^{2p}}{1 + b_1 r^2 + b_2 r^4 + b_3 r^6 + \dots + b_q r^{2q}}.$$

Al fine di soddisfare le condizioni al bordo, si ha che

$$\rho(0) = 0 \implies a_0 = 0, \quad \rho(\infty) = 1 \implies p = q, \quad b_q = a_p$$

A seguito di queste semplificazioni, l'approssimazione diagonale di Padé con $2q - 1$ coefficienti al numeratore e al denominatore, di grado r^{2q} risulta essere

$$(8) \quad \rho_q(r) = \frac{a_1 r^2 + a_2 r^4 + a_3 r^6 + \dots + a_q r^{2q}}{1 + b_1 r^2 + b_2 r^4 + b_3 r^6 + \dots + a_q r^{2q}}.$$

In molti articoli, ad esempio [3], l'approssimazione (8) è normalmente limitata a $q = 2$, cioè

$$(9) \quad \rho_2(r) = \frac{a_1 r^2 + a_2 r^4}{1 + b_1 r^2 + a_2 r^4},$$

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

L'approssimazione (9), anche se molto utilizzata, non risulta essere ottimale: la funzione $\rho(r)$ avrebbe un massimo oltre $\rho(\infty) = 1$ per $\hat{r} = \sqrt{24(4 + \sqrt{18})}$, unica soluzione positiva di $r^4 - 192r^2 - 1152$, funzione ottenuta imponendo $\rho'_2(r) = 0$. La soluzione dell'equazione (6) non può avere un massimo superiore ad 1, corrispondente a $\rho'(\hat{r}) = 0$, in quanto la derivata seconda

$$\rho''(\hat{r}) = \frac{2\rho'(\hat{r})}{\hat{r}^2} + 2(\rho(\hat{r}) - 1)\rho(\hat{r})$$

risulterebbe essere positiva.

A causa di queste limitazioni, utilizzeremo un'approssimazione di Padé di ordine 4, introdotta in [4]:

$$(10) \quad \rho_4(r) = \frac{a_1 r^2 + a_2 r^4 + a_3 r^6 + a_4 r^8}{1 + b_1 r^2 + b_2 r^4 + b_3 r^6 + a_4 r^8},$$

dove

$$\begin{array}{l|l}
a_1 & 0.34010790700196714760 \\
b_1 & \frac{230a_1^2 + 656a_1^2 - 421a_1 - 28}{7680a_1^2 - 1680a_1 - 330} \\
a_2 & a_1 \left(b_1 - \frac{1}{4} \right) \\
b_2 & \frac{(737280a_1^3 + 209920a_1^2 - 134720a_1 - 8960)b_1 - 364544a_1^3 + 70144a_1^2 + 18256a_1 + 393}{2457600a_1^2 - 537600a_1 - 105600} \\
a_3 & \frac{a_1(192b_2 - 48b_1 + 16a_1 + 5)}{192} \\
b_3 & \frac{(61440a_1 - 9600)b_2 + (-30720a_1^2 + 640a_1 + 560)b_1 + 8448a_1^2 - 1056a_1 - 21}{368640a_1 - 92160} \\
a_4 & \frac{4608a_1b_3 - 1152a_1b_2 + (384a_1^2 + 120a_1)b_1 - 128a_1^2 - 7a_1}{4608}
\end{array}$$

Considerato ora il singolo vortice, si verifica che è stazionario.

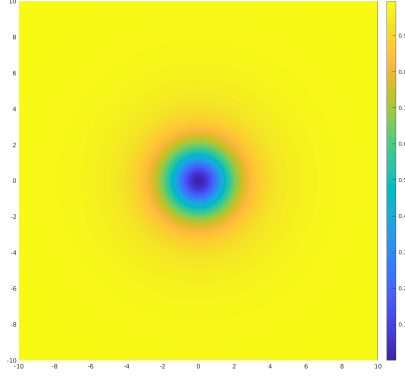


FIGURA 1. $|\psi|^2$ del vortice in un dominio $[-10, 10] \times [-10, 10]$ al tempo $t = 25$: il dominio è stato discretizzato con 1000 punti per ogni asse. All'inizio della simulazione il vortice era centrato in $(0, 0)$.

La simulazione del vortice stazionario permette di osservare che nella dinamica di strutture quantistiche si presentano delle zone del dominio in cui il fenomeno è più eterogeneo e diversificato: si noti la differenza di $|\psi|^2$ nei pressi del centro del vortice.

Al contrario, al di fuori della corona circolare del vortice il fenomeno è molto più omogeneo, dove $|\psi|^2 \approx 1$.

CAPITOLO 3

Metodi numerici

Supposto il caso bidimensionale, descriviamo ora i metodi numerici utilizzati nelle simulazioni.

Ripresa l'equazione di Gross-Pitaevskii (4)

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

consideriamo come condizione al bordo le condizioni di Neumann omogenee.

3.1. Strang Splitting

Per prima cosa utilizziamo il metodo di time splitting dividendo l'equazione (4) in due fasi temporali, al fine di separare l'operatore lineare dall'operatore non lineare:

$$(11) \quad \partial_t \psi = \frac{i}{2} \nabla^2 \psi ,$$

$$(12) \quad \partial_t \psi = \frac{i}{2} (1 - |\psi|^2) \psi .$$

Si noti che l'equazione (12) è un'equazione differenziale non lineare a causa della presenza di $(1 - |\psi|^2)$. Consideriamo quindi la coniugata dell'equazione (12)

$$\partial_t \bar{\psi} = -\frac{i}{2} (1 - |\bar{\psi}|^2) \bar{\psi} = -\frac{i}{2} (1 - |\psi|^2) \bar{\psi}$$

e calcoliamo $\partial_t |\psi|^2$:

$$\partial_t |\psi|^2 = \partial_t (\psi \bar{\psi}) = \partial_t \psi \bar{\psi} + \psi \partial_t \bar{\psi} = \frac{i}{2} (1 - |\psi|^2) \psi \bar{\psi} + \psi \left[-\frac{i}{2} (1 - |\psi|^2) \bar{\psi} \right] = 0 ,$$

perciò $|\psi|^2$ non dipende dal tempo e ciò implica che la soluzione dell'equazione (12) è

$$(13) \quad \psi(x, y, t) = e^{t \frac{i}{2} (1 - |\psi(x, y, 0)|^2)} \psi(x, y, 0) .$$

Per illustrare al meglio lo schema di Strang Splitting, riformuliamo l'equazione differenziale parziale come un'equazione differenziale ordinaria, rimuovendo la dipendenza dallo spazio: considereremo d'ora in avanti $\psi(x, y, t) = u(t)$.

Applicato il metodo delle differenze finite, si ottiene il seguente problema ai valori iniziali

$$(14) \quad u'(t) = [A + B(u(t))] u(t) , \quad u(t_0) = u_0 ,$$

dove

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

Analizziamo ora la rappresentazione secondo le differenze finite di $\frac{i}{2}\nabla^2\psi$ nell'equazione (14):

$$u'(t) = Au(t),$$

la cui soluzione è

$$u(t) = e^{tA}u_0.$$

Ora, sapendo che

$$A = I \otimes A_1 + A_2 \otimes I,$$

si ottiene

$$(15) \quad u(t) = e^{tA}u_0 = (e^{tA_1})u_0(e^{tA_2})^\top.$$

La soluzione quindi può essere determinata ricorsivamente da Strang Splitting:

$$(16) \quad \begin{aligned} u_{n+\frac{1}{3}} &= e^{\frac{\Delta t}{2}B(u_n)}u_n \\ u_{n+\frac{2}{3}} &= e^{\Delta t A}u_{n+\frac{1}{3}} = (e^{\Delta t A_1})u_{n+\frac{1}{3}}(e^{\Delta t A_2})^\top \\ u_{n+1} &= e^{\frac{\Delta t}{2}B(u_{n+\frac{2}{3}})}u_{n+\frac{2}{3}}. \end{aligned}$$

3.2. LUMR

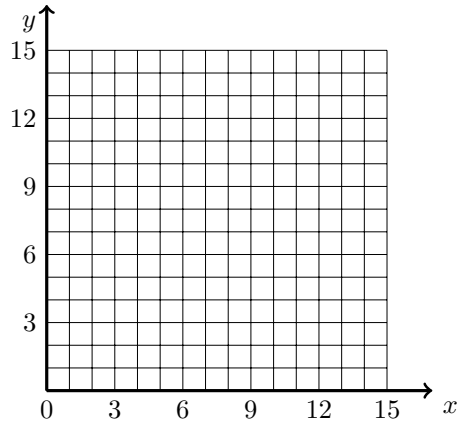
Verrà ora trattato l'algoritmo LUMR, chiamato anche metodo di raffinamento uniforme locale [5]: l'algoritmo entra in gioco ad ogni passo temporale della simulazione, subito dopo il calcolo di u_{n+1} mediante il metodo di Strang Splitting (16). Il metodo LUMR, come sviluppato in [5], basa il raffinamento uniforme mediante un criterio di stima dell'errore: in questa trattazione, però, si utilizzerà un criterio di raffinamento basato sulla determinazione delle zone di maggior interesse, in particolar modo nei pressi dei centri dei vortici quantistici.

Considerata la soluzione numerica al passo $n+1$, definiamo la funzione di soglia per ogni punto rappresentato dalla soluzione u_{n+1} come

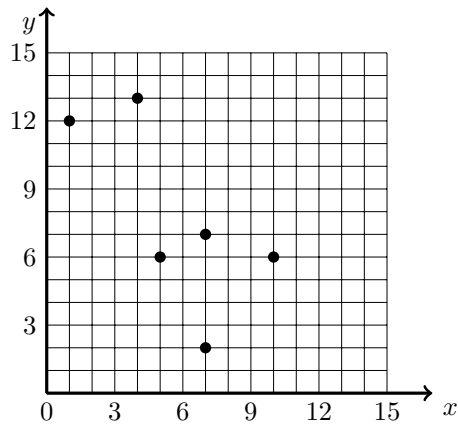
$$(17) \quad |u_{n+1}| \leq \omega,$$

con ω parametro da fissare: la funzione di soglia sarà utilizzata per determinare i punti della discretizzazione della soluzione che necessitano di un calcolo più accurato.

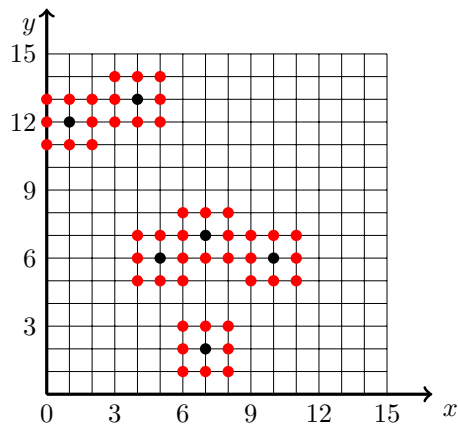
Sia $\omega = \frac{1}{2}$. Per illustrare la prima fase dell'algoritmo, consideriamo come esempio un dominio discretizzato $[0, 15] \times [0, 15]$ con $h = 1$, discretizzazione analoga sia sull'asse x che sull'asse y :



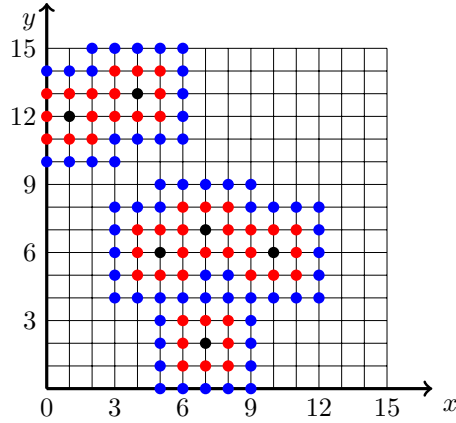
Considerata una soluzione u_{n+1} , applichiamo la funzione di soglia sui singoli punti del dominio. Nel caso in cui la condizione (17) sia soddisfatta in un punto, quest'ultimo viene contrassegnato:



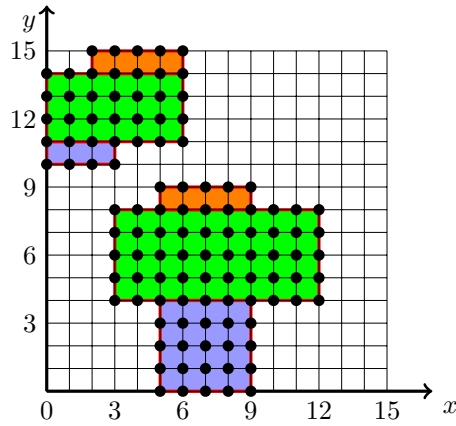
A questo punto l'algoritmo prevede che tutti i punti limitrofi, cioè tutti i punti che rappresentano i vertici di un rettangolo che ha almeno un vertice contrassegnato, vengano a loro volta contrassegnati:



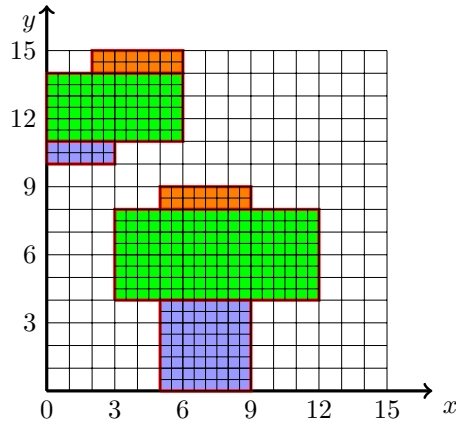
Ulteriormente si contrassegnano tutti i punti limitrofi:



A questo punto vengono generate le strutture che rappresentano i sottodomini: in questo elaborato è stato deciso di generare strutture rettangolari più grandi possibili. Rimandiamo al Capitolo 5 per la trattazione di tale scelta.



Ora, per ogni sottodominio la discretizzazione, rispetto al dominio, viene raddoppiata lungo ogni asse (in questo esempio si ha quindi $h = \frac{1}{2}$ nei sottodomini):



Si consideri ora un sottodominio S_i determinato come visto in precedenza: l'equazione in esame è sempre (4). Supponiamo inoltre di essere nell'intervallo

temporale $[t_n, t_{n+1}]$, con soluzioni sul dominio di partenza

$$u(t_n) \approx u_n, \quad u(t_{n+1}) \approx u_{n+1}.$$

Per determinare le condizioni iniziali dell'equazione di Gross–Pitaevskii su S_i , abbiamo due casi possibili: se il passo temporale è il primo, calcoliamo direttamente il dato iniziale sul sottodominio S_i , altrimenti applichiamo l'interpolazione cubica locale utilizzando la soluzione u_n calcolata al tempo t_n sul dominio di partenza. Definiamo quindi la condizione iniziale del problema del sottodominio S_i come $u_n^{S_i}$.

Per imporre le condizioni al bordo sul sottodominio, consideriamo: la condizione iniziale $u_n^{S_i}$, la derivata temporale iniziale $\partial_t u_n^{S_i}$ (ricavata come interpolazione su S_i a partire dalla derivata $\partial_t u_n$), la condizione finale $u_{n+1}^{S_i}$ (ricavata come interpolazione di u_{n+1}) e la sua derivata temporale $\partial_t u_{n+1}^{S_i}$ (ricavata come interpolazione su S_i a partire dalla derivata $\partial_t u_{n+1}$).

Considerate le restrizioni al bordo di ciascun elemento sopra citato (dove \tilde{s} identifica la restrizione di s al bordo del sottodominio), viene applicata l'interpolazione di Hermite in funzione del tempo

$$(18) \quad \begin{aligned} G(t) = & u_n^{S_i} + \partial_t \tilde{u}_n^{S_i} (t - t_n) + u^{S_i} [t_n, \tilde{t}_n, t_{n+1}] (t - t_n)^2 + \\ & + u^{S_i} [t_n, t_n, \tilde{t}_{n+1}, t_{n+1}] (t - t_n)^2 (t - t_{n+1}), \end{aligned}$$

dove

$$u^{S_i} [t_n, \tilde{t}_n, t_{n+1}] =: d_3, \quad u^{S_i} [t_n, t_n, \tilde{t}_{n+1}, t_{n+1}] =: d_4,$$

rappresentano le differenze divise.

Ripresa l'equazione (4) si noti che, a seguito della discretizzazione secondo le differenze finite, la condizione al bordo può essere impostata come la derivata prima dell'interpolazione di Hermite

$$(19) \quad G'(t) = \partial_t \tilde{u}_n^{S_i} + 2d_3 (t - t_n) + d_4 [2(t - t_n)(t - t_{n+1}) + (t - t_n)^2].$$

Considerate inoltre le restrizioni all'interno del sottodominio \tilde{A} e \tilde{B} degli operatori A e B trattati in (14), si ottiene l'equazione differenziale ordinaria

$$(20) \quad u^{S_i'}(t) = [\tilde{A} + \tilde{B}(u^{S_i}(t))] u^{S_i}(t) + G'(t), \quad u^{S_i}(t_n) = u_n^{S_i},$$

da risolvere nell'intervallo temporale $[t_n, t_{n+1}]$.

Prima di risolvere l'equazione (20), per semplicità di notazione, sia

$$F(t, u^{S_i}(t)) := [\tilde{A} + \tilde{B}(u^{S_i}(t))] u^{S_i}(t) + G'(t).$$

Per risolvere l'equazione (20) in $[t_n, t_{n+1}]$ è stato applicato il metodo di Heun: per mantenere la stabilità del metodo si è optato per iterare 100 volte il calcolo nell'intervallo di lavoro $[t_n, t_{n+1}]$, considerando una discretizzazione temporale con $k = \frac{t_{n+1} - t_n}{100 - 1}$.

Il metodo di Heun, per l'equazione (20), per $j + \frac{1}{100}, j \in [0, \frac{1}{100}, \frac{2}{100}, \dots, \frac{99}{100}]$ è

$$(21) \quad \begin{aligned} \xi_1 &= u_{n+j}^{S_i}, \\ \xi_2 &= u_{n+j}^{S_i} + kF(t_{n+j}, \xi_1), \\ u_{n+(j+\frac{1}{100})}^{S_i} &= u_{n+j}^{S_i} + \frac{k}{2}F(t_{n+j}, \xi_1) + \frac{k}{2}F(t_{n+(j+\frac{1}{100})}, \xi_2). \end{aligned}$$

Ottenuta la soluzione $u_{n+1}^{S_i}$ sul sottodominio S_i tramite (21), iniettiamo la soluzione in u_{n+1} : il valore ottenuto, in ogni punto appartenente sia alla discretizzazione di $u_{n+1}^{S_i}$ che alla discretizzazione di u_{n+1} , viene copiato da $u_{n+1}^{S_i}$ e sovrascritto in u_{n+1} .

CAPITOLO 4

Simulazioni numeriche

Verranno ora illustrati i risultati delle simulazioni del modello descritto nel Capitolo 2: per semplicità la prima simulazione è stata condotta per un singolo vortice e successivamente per due vortici orientati nella stessa direzione e in direzioni opposte.

Considerato un dominio bidimensionale $[0, 20] \times [0, 20]$, sia il dato iniziale $\psi_0 = \sqrt{\rho_0} e^{iS_0}$ di un singolo vortice traslato di (x_0, y_0) rispetto all'origine degli assi. Viene perciò modificata l'espressione del raggio

$$r_0^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$$

e si calcola ρ_0 mediante l'approssimazione di Padé (10). Per S_0 , in base al senso di rotazione del vortice

$$S_0 = \text{atan2} \left(\frac{y - y_0}{x - x_0} \right)$$

se la rotazione è oraria, oppure

$$S_0 = -\text{atan2} \left(\frac{y - y_0}{x - x_0} \right)$$

se la rotazione è antioraria.

Nel caso in cui fossero presenti n vortici, analogamente a quanto visto in precedenza si calcolano tutte le singole condizioni iniziali ψ_i di ciascun vortice, indipendentemente una dall'altra, e si impone come condizione iniziale

$$\psi_0 = \prod_{j=1}^n \psi_j, \quad j = 1, \dots, n$$

da analizzare in maniera analoga al singolo vortice, utilizzando i metodi descritti nel Capitolo 3.

Per una più facile ed immediata rappresentazione della soluzione $\psi = a + ib$ al tempo t , verrà mostrata la variazione temporale del modulo al quadrato

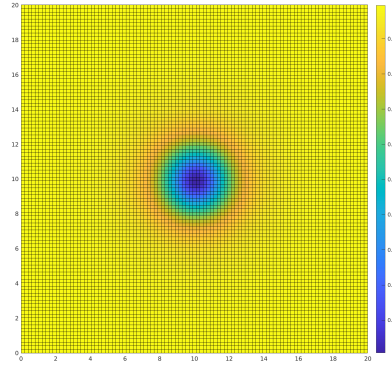
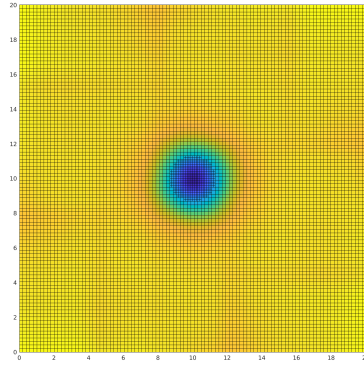
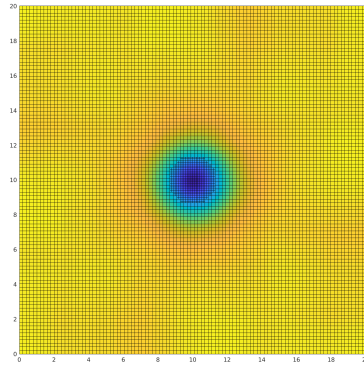
$$|\psi|^2 = a^2 + b^2.$$

Modificando la rotazione dei vortici si osservano comportamenti differenti: imponendo la medesima rotazione per due vortici si osserva una rotazione di ψ_0 , invece ponendo rotazioni opposte si osserva una traslazione della condizione iniziale.

Nelle seguenti simulazioni, svolte nei linguaggi MATLAB® e GNU Octave, è stata considerata una discretizzazione spaziale analoga lungo ogni asse, utilizzando $m = 100$ punti per asse, quindi $h = \frac{20-0}{m-1} \approx 0.2020$.

Per quanto riguarda il dominio temporale, si consideri $t \in [0, 120]$, con passo temporale $k \approx 0.0300$.

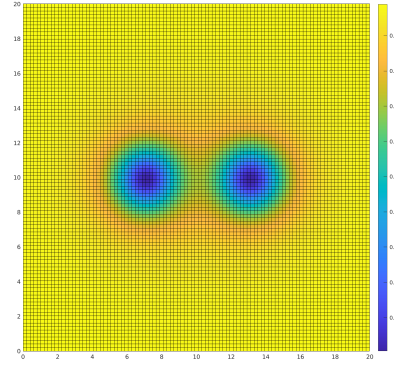
La prima simulazione in esame è il singolo vortice antiorario centrato in $(10, 10)$.

(A) $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$ (B) $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$ (C) $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$

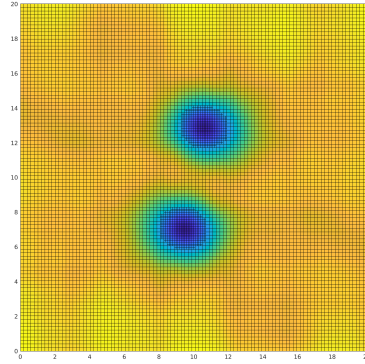
Non si è notato alcun cambiamento significativo durante la simulazione: si noti in particolare la discretizzazione più fine nel centro del vortice, data dall'azione del metodo LUMR.

Si consideri ora due vortici orientati in senso orario: ψ_1 centrato in $(7, 10)$ e ψ_2 centrato in $(13, 10)$. Si ha che il dato iniziale è

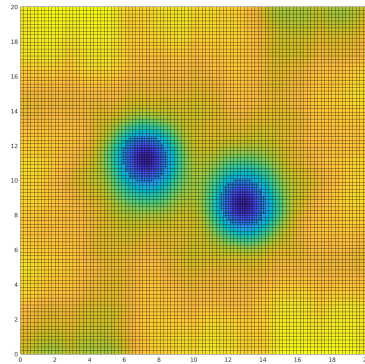
$$\psi_0 = \psi_1 \psi_2 .$$



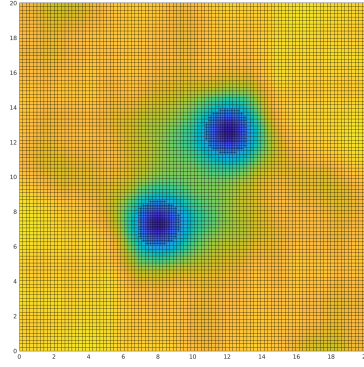
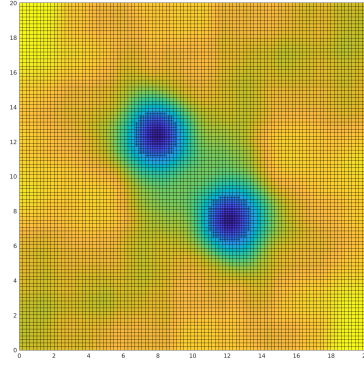
(A) $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$



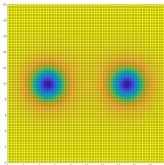
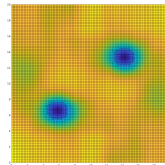
(B) $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$

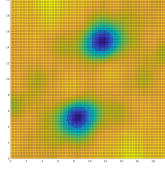
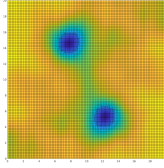
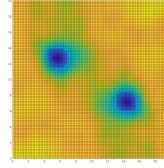


(C) $|\psi|^2$ al tempo $t = 60$

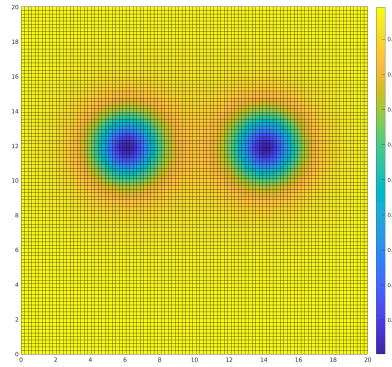
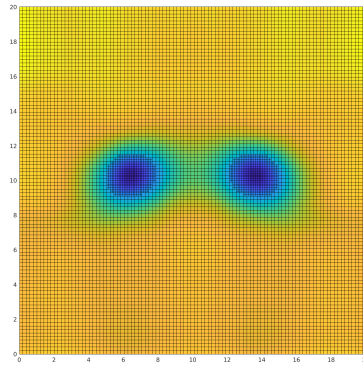
(D) $|\psi|^2$ al tempo $t = 90$ (E) $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$

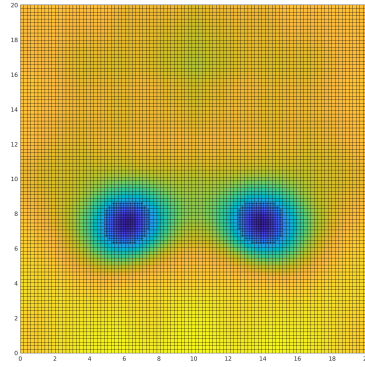
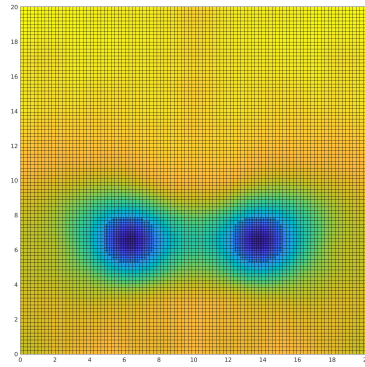
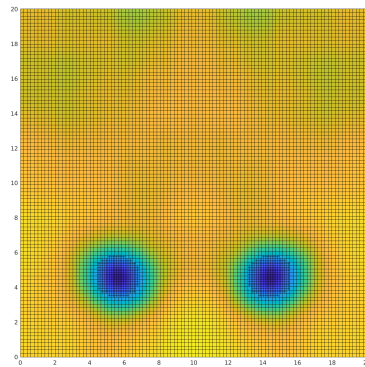
Si noti che, dati due vortici orientati in senso orario, la rotazione complessiva del fenomeno è in senso antiorario. Si è notato, spostando i vortici ed effettuando varie simulazioni, che la velocità di rotazione dipende dalla distanza dei centri dei vortici ψ_i : in particolare se i centri sono più vicini il sistema ruota più velocemente, al contrario se essi sono più distanti il sistema ruota più lentamente. Per mostrare ciò, simuliamo due vortici orari centrati in $(5, 10)$ e in $(15, 10)$.

(A) $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$ (B) $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$

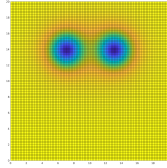
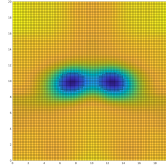
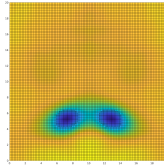
(c) $|\psi|^2$ al tempo $t = 60$ (d) $|\psi|^2$ al tempo $t = 90$ (e) $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$

Si considerino ora un vortice antiorario ψ_1 , centrato in $(6, 12)$, e un vortice orario ψ_2 centrato in $(14, 12)$: notare la traslazione verso il basso rispetto alla condizione iniziale ψ_0 .

(A) $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$ (B) $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$

(c) $|\psi|^2$ al tempo $t = 60$ (d) $|\psi|^2$ al tempo $t = 90$ (e) $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$

Come nel fenomeno della rotazione, anche nella traslazione è presente una dipendenza della velocità di movimento in funzione della distanza dei centri dei vortici: consideriamo quindi due vortici, uno antiorario e uno orario, rispettivamente centrati in $(7, 14)$ e in $(13, 14)$.

(A) $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$ (B) $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$ (C) $|\psi|^2$ al tempo $t = 60$

Notare che, avvicinando i centri dei vortici, la velocità di traslazione è aumentata considerevolmente.

Sviluppi futuri

In questo capitolo verranno discussi alcuni possibili miglioramenti dell'algoritmo di simulazione della dinamica di vortici quantistici, con particolare attenzione al metodo di raffinamento uniforme locale.

Come mostrato nella Sezione 3.2, si è optato per generare sottodomini rettangolari: questa scelta è stata guidata da una prima idea di utilizzare il metodo di Strang Splitting (16) anche sui sottodomini, in quanto avrebbe permesso di rendere il metodo più performante, in particolare grazie al calcolo dell'esponenziale di matrice, come visto in (15).

È stata incontrata, però, la difficoltà d'implementazione del sistema da risolvere, in quanto le condizioni al bordo sui sottodomini sono funzioni del tempo (19) e non sono ovviamente omogenee: è stato quindi deciso di mantenere la suddivisione in sottodomini di forma rettangolare, piuttosto che generare strutture contigue più complesse che rappresentassero i punti contrassegnati.

Un vantaggio che questa scelta ha portato è la possibile parallelizzazione del calcolo della soluzione sui sottodomini: per ogni passo temporale del metodo di Strang Splitting, il problema in ciascun sottodominio è indipendente rispetto alle altre imposizioni del problema.

È quindi possibile svolgere indipendentemente il calcolo di ciascuna soluzione su qualsiasi sottodominio: con qualche modifica si può ridurre ulteriormente il tempo di calcolo modificando l'algoritmo LUMR e introducendo una parallelizzazione secondo multithreading, ad esempio utilizzando OpenMP.

Analogamente al problema bidimensionale, è possibile applicare il metodo di raffinamento uniforme locale anche a simulazioni tridimensionali della dinamica di vortici quantistici: in particolare è possibile osservare le riconessioni dei vortici, per cui diventa importante raffinare il dominio di simulazione in corrispondenza dei fenomeni che si intendono studiare.

CAPITOLO 6

Conclusioni

L'obiettivo della presente trattazione è stato analizzare un'approccio innovativo allo studio di strutture quantistiche, basato sull'utilizzo e implementazione di tecniche di raffinamento uniforme locale nelle zone di particolare interesse della simulazione numerica: nel caso trattato le zone d'interesse erano coincidenti con le zone più centrali dei singoli vortici coinvolti nella simulazione, dove un'analisi più dettagliata e fine è fondamentale.

Nella prima fase dell'elaborato è stato ricavato il modello di Gross-Pitaevskii, trasformato poi in un'equazione adimensionale. Successivamente è stata cercata una soluzione dell'equazione, utilizzando un'approssimazione di Padé che soddisfacesse le condizioni fisiche imposte dal modello. In seguito l'equazione è stata risolta numericamente mediante il metodo di Strang Splitting su tutti i punti della discretizzazione del dominio e dal metodo LUMR sui punti in cui era necessario svolgere un'analisi più accurata.

Introducendo il metodo LUMR nell'algoritmo di risoluzione del problema (trattato nella Sezione 3.2), si è potuto simulare con una buona precisione le dinamiche dei vortici interagenti, utilizzando un numero ridotto di punti di discretizzazione del dominio di lavoro.

Bibliografia

- [1] P H. Roberts e N G. Berloff. “The Nonlinear Schrödinger Equation as a Model of Superfluidity”. In: *Quantized Vortex Dynamics and Superfluid Turbulence*. Springer Berlin Heidelberg, 2001, pp. 235–257.
- [2] S. Zuccher, M. Caliari, A. W. Baggaley e C. F. Barenghi. “Quantum vortex reconnections”. In: *Physics of Fluids* 24.12 (2012), p. 125108.
- [3] N G Berloff. “Padé approximations of solitary wave solutions of the Gross–Pitaevskii equation”. In: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 37.5 (2004), pp. 1617–1632.
- [4] M. Caliari e S. Zuccher. “Reliability of the time splitting Fourier method for singular solutions in quantum fluids”. In: *Computer Physics Communications* 222 (2018), pp. 46–58.
- [5] R.A. Trompert e J.G. Verwer. “A static-regridding method for two-dimensional parabolic partial differential equations”. In: *Applied Numerical Mathematics* 8.1 (1991), pp. 65–90.