

Raffinamento uniforme locale per la dinamica di strutture quantistiche

Presentazione della tesi di Laurea
Corso di Laurea in Matematica Applicata

Candidato: Gianmaria Lucca

Relatore: Prof. Marco Caliari

Università degli Studi di Verona

- ① Introduzione
- ② L'equazione di Gross–Pitaevskii
Il dato iniziale
- ③ Metodi Numerici
Strang Splitting
LUMR
- ④ Simulazioni Numeriche
- ⑤ Sviluppi futuri
- ⑥ Bibliografia

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

Consideriamo *l'equazione di Gross-Pitaevskii*:

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

con $\lim_{|x| \rightarrow \infty} |\psi(x, t)| = 1$.

Il dato iniziale

Determiniamo ora una soluzione dell'equazione (1) che rappresenti un vortice nero (**dark vortex**) bidimensionale.

Per determinare una soluzione centrata nell'origine, sia [1]

$$\psi = \sqrt{\rho(r)} e^{i\theta}, \quad (2)$$

con θ angolo azimutale del vortice bidimensionale.

È risaputo [2] che l'approssimazione di Padé di $\rho(r)$ mantiene unicamente le potenze pari sia al numeratore che al denominatore. Utilizzeremo per il dato iniziale un'approssimazione di Padé di ordine 4, introdotta in [3]:

$$\rho_4(r) = \frac{a_1 r^2 + a_2 r^4 + a_3 r^6 + a_4 r^8}{1 + b_1 r^2 + b_2 r^4 + b_3 r^6 + b_4 r^8}, \quad (3)$$

dove

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	$\frac{4608a_1b_3 - 1152a_1b_2 + (384a_1^2 + 120a_1)b_1 - 128a_1^2 - 7a_1}{4608}$

Tratteremo ora i metodi utilizzati nelle simulazioni: utilizzeremo il metodo di Strang Splitting sul domino del problema e applicheremo l'algoritmo LUMR ai sottodomini d'interesse.

Ripresa l'equazione di Gross–Pitaevskii (1):

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

consideriamo come condizione al bordo le condizioni di Neumann omogenee.

Strang Splitting

Applicato il metodo delle differenze finite, sia $\psi(x, y, t) = u(t)$.
L'equazione (1) diventa:

$$u'(t) = [A + B(u(t))] u(t), \quad u(t_0) = u_0, \quad (4)$$

dove

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

Si verifica che $|\psi|^2$ non dipende dal tempo: sapendo inoltre che

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

la soluzione di (4) è determinata ricorsivamente mediante il metodo di Strang Splitting:

$$\begin{aligned} u_{n+\frac{1}{3}} &= e^{\frac{\Delta t}{2} B(u_n)} u_n \\ u_{n+\frac{2}{3}} &= (e^{\Delta t A_1}) u_{n+\frac{1}{3}} (e^{\Delta t A_2})^\top \\ u_{n+1} &= e^{\frac{\Delta t}{2} B(u_{n+\frac{2}{3}})} u_{n+\frac{2}{3}} \end{aligned} \tag{5}$$

LUMR

Verrà ora trattato un algoritmo basato sul LUMR (*Local Uniform Method of Regridding*) [4]: l'algoritmo entra in gioco ad ogni passo temporale della simulazione, subito dopo il calcolo della soluzione numerica al tempo t_n mediante il metodo di Strang Splitting.

- **Contrassegno dei punti:** data la soluzione numerica u_{n+1} , il metodo utilizza la *funzione di soglia*

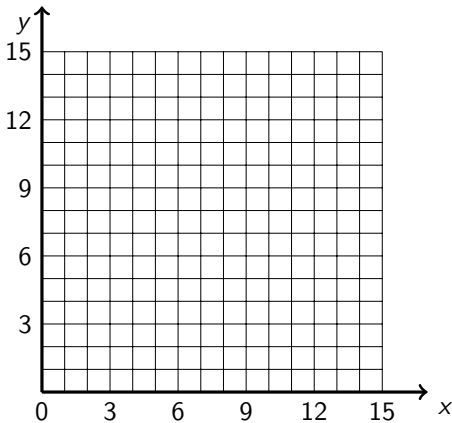
$$|u_{n+1}| \leq \omega, \quad (6)$$

per determinare quali punti della griglia necessitano di un'analisi più accurata

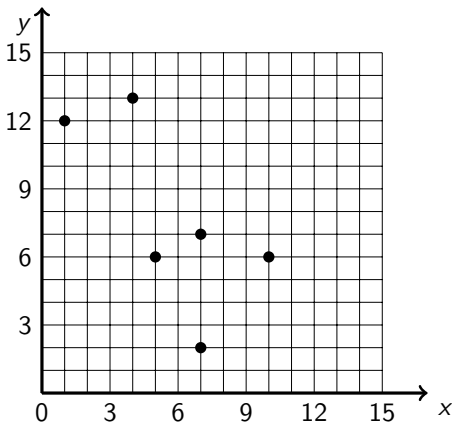
- **Generazione delle strutture dei sottodomini**
- **Risoluzione dei sottoproblemi**
- **Iniezione delle soluzioni dei sottoproblemi nella soluzione del problema**

Illustriamo ora l'algoritmo con un esempio.

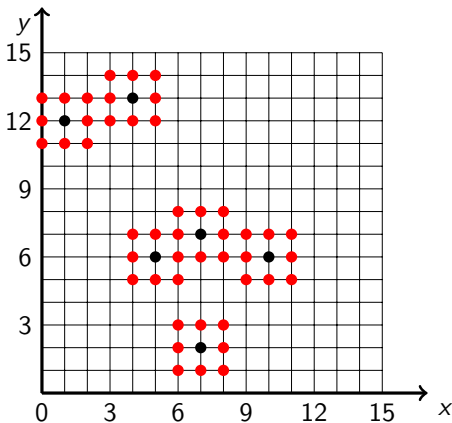
Sia $\omega = \frac{1}{2}$. Per illustrare la prima fase, consideriamo ad esempio un dominio discretizzato $[0, 15] \times [0, 15]$ con $h = 1$, discretizzazione analoga sia sull'asse x che sull'asse y :



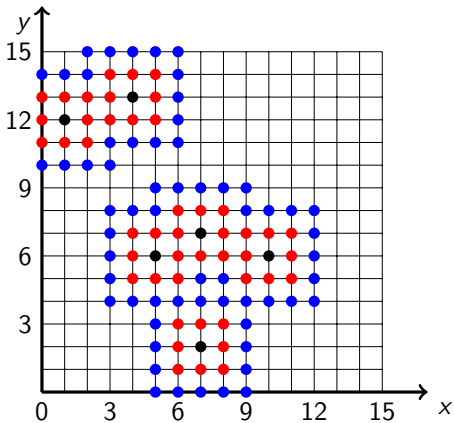
Considerata una soluzione u_{n+1} , applichiamo la funzione di soglia sui singoli punti del dominio. Nel caso in cui la condizione (6) sia soddisfatta in un punto, quest'ultimo viene contrassegnato:



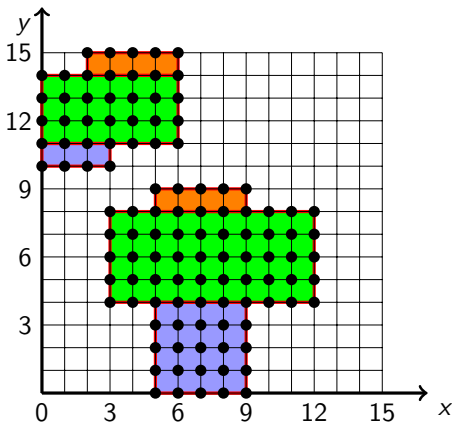
A questo punto l'algoritmo prevede che tutti i *punti limitrofi*, cioè tutti i punti che rappresentano i vertici di un rettangolo che ha almeno un vertice contrassegnato, vengano a loro volta contrassegnati:



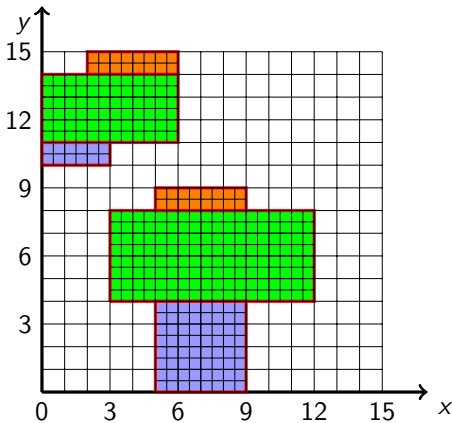
Ulteriormente si contrassegnano tutti i *punti limitrofi*:



A questo punto vengono generate le strutture che rappresentano i sottodomini: in questo elaborato è stato deciso di generare strutture rettangolari il più grandi possibili.



Per ogni sottodominio la discretizzazione, rispetto al dominio, viene raddoppiata lungo ogni asse:



Sia ora un sottodominio S_i nell'intervallo temporale $[t_n, t_{n+1}]$, con soluzioni sul dominio di partenza

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

l'equazione in esame è sempre (1).

Per determinare le **condizioni iniziali** dell'equazione su S_i , vi sono due casi:

- *il passo temporale è il primo*: calcolo del dato iniziale su S_i
- *il passo temporale non è il primo*: interpolazione cubica locale sul sottodominio

Sia $u_n^{S_i}$ la condizione iniziale su S_i .

Per le **condizioni al bordo** sul sottodominio S_i , si consideri:

$$u_n^{S_i}, \quad \partial_t u_n^{S_i}, \quad u_{n+1}^{S_i}, \quad \partial_t u_{n+1}^{S_i},$$

ricavati mediante interpolazione cubica locale dai corrispettivi valori nel dominio.

Considerate le *restrizioni al bordo* degli elementi sopra citati, si applica l'interpolazione di Hermite $G(t)$ in funzione del tempo:

$$G(t) = u_n^{\tilde{S}_i} + \partial_t \tilde{u}_n^{\tilde{S}_i} (t - t_n) + u^{S_i} [t_n, \tilde{t}_n, t_{n+1}] (t - t_n)^2 + \\ + u^{S_i} [t_n, t_n, \tilde{t}_{n+1}, t_{n+1}] (t - t_n)^2 (t - t_{n+1}), \quad (7)$$

dove \tilde{q} identifica la restrizione al bordo di q .

Si osservi che $G'(t)$ è la condizione al bordo dell'equazione (1), a seguito della discretizzazione secondo differenze finite.

Considerate inoltre le restrizioni all'interno del sottodominio \check{A} e \check{B} degli operatori A e B trattati in (4), si ottiene l'equazione differenziale ordinaria

$$u^{S_i'}(t) = [\check{A} + \check{B}(u^{S_i}(t))] u^{S_i}(t) + G'(t), \quad u^{S_i}(t_n) = u_n^{S_i}, \quad (8)$$

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

Per semplicità di notazione, sia

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

Risolviemo l'equazione (8) in $[t_n, t_{n+1}]$ applicando 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 $k = \frac{t_{n+1} - t_n}{100 - 1}$, per $j + \frac{1}{100}, j \in [0, \frac{1}{100}, \frac{2}{100}, \dots, \frac{99}{100}]$ si ha

$$\begin{aligned}\xi_1 &= u_{n+j}^{S_i}, \\ \xi_2 &= u_{n+j}^{S_i} + kF(t_{n+j}, \xi_1), \\ u_{n+(j+\frac{1}{100})}^{S_i} &= u_{n+j}^{S_i} + \frac{k}{2}F(t_{n+j}, \xi_1) + \frac{k}{2}F\left(t_{n+(j+\frac{1}{100})}, \xi_2\right).\end{aligned}\tag{9}$$

Ottenuta la soluzione $u_{n+1}^{S_i}$ sul sottodominio S_i tramite (9), *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} .

Simulazioni Numeriche

Verranno ora trattati diversi tipi di simulazione:

- Vortice singolo
- Vortici rotanti
- Vortici traslanti

Per tutte le simulazioni è stata considerata una discretizzazione spaziale analoga lungo ogni asse, utilizzando $m = 100$ punti per asse ($h = \frac{20-0}{m-1} \approx 0.2020$).

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

Vortice singolo I

Considerato un vortice singolo antiorario centrato in (10, 10):

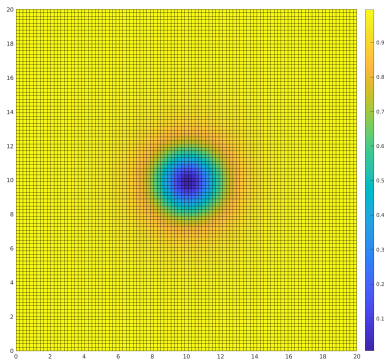


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$.

Vortice singolo II

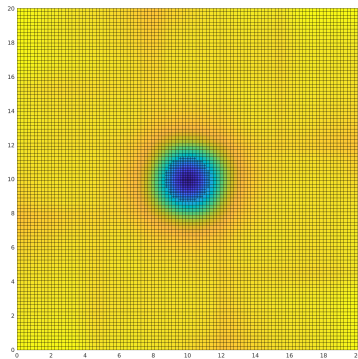


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$.

Notare la discretizzazione più fine nel centro del vortice.

Vortice singolo III

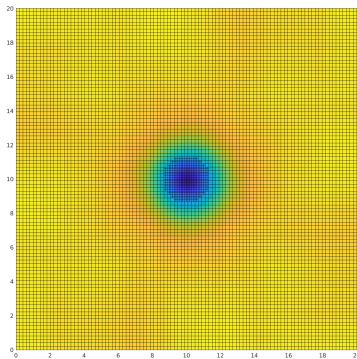


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$.

Non si è notato alcun cambiamento significativo durante la simulazione.

Vortici rotanti I

Considerati due vortici orientati in senso orario, centrati rispettivamente in $(7, 10)$ e $(13, 10)$:

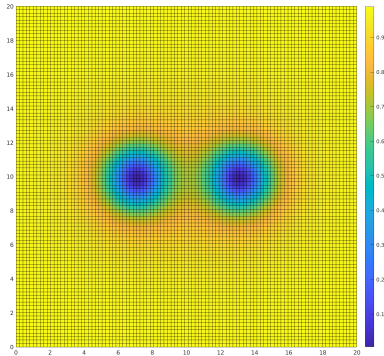


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$.

Vortici rotanti II

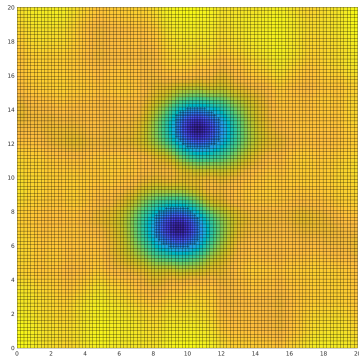


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$.

Vortici rotanti III

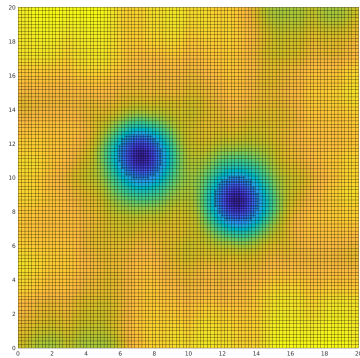


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 60$.

Vortici rotanti IV

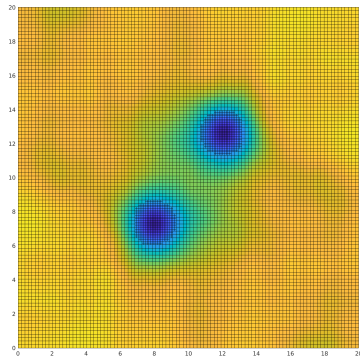


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 90$.

Vortici rotanti V

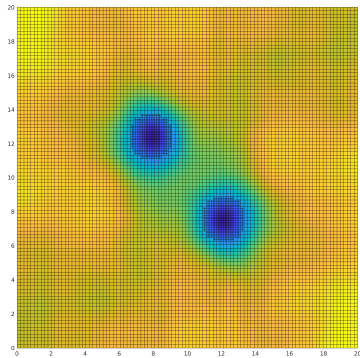
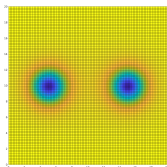
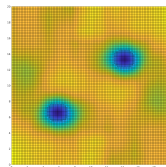


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$.

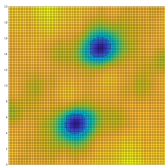
Si osservi ora la dipendenza della velocità di rotazione in base alla distanza dei centri dei vortici:



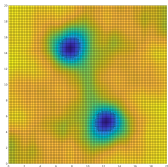
(a) $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$



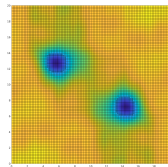
(b) $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$



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



(d) $|\psi|^2$ al tempo $t = 90$



(e) $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$

Si noti che allontanando i centri la velocità diminuisce: al contrario, riducendo la distanza la velocità di rotazione aumenta.

Vortici traslanti I

Considerato un vortice antiorario centrato in $(6, 12)$ e un vortice orario centrato in $(14, 12)$:

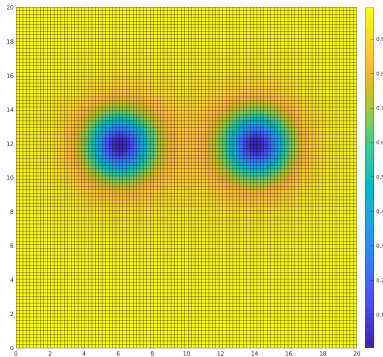


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 0$.

Vortici traslanti II

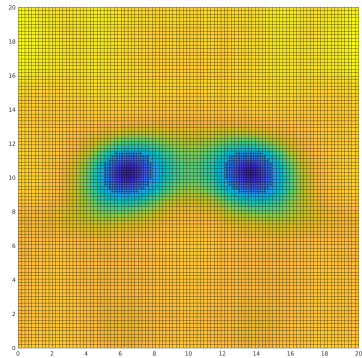


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 30$.

Vortici traslanti III

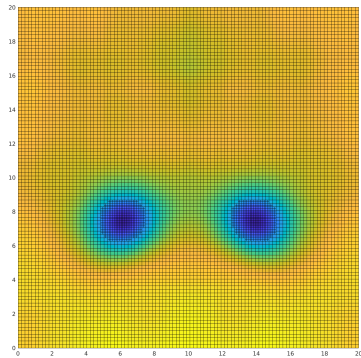


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 60$.

Vortici traslanti IV

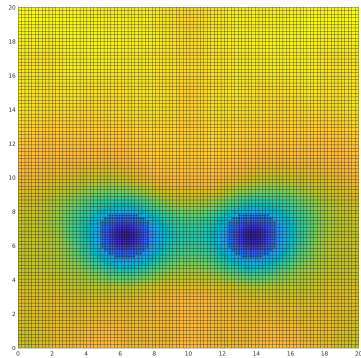


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 90$.

Vortici traslanti V

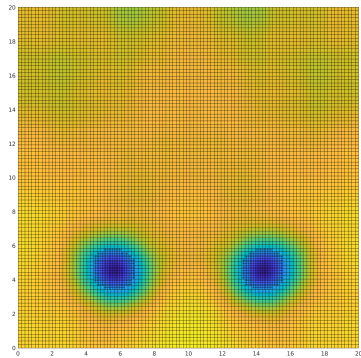
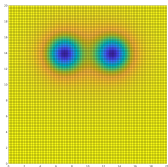
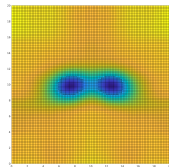


Figura: $|\psi|^2$ al tempo $t = 120$.

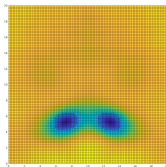
Si osservi ora la dipendenza della velocità di traslazione in base alla distanza dei centri dei vortici:



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



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







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

Come per la rotazione, avvicinando i centri la velocità aumenta.

Sviluppi futuri

- **Parallelizzazione dell'algoritmo:** con opportune modifiche, è possibile risolvere i sottoproblemi *indipendentemente* in parallelo (e.g. OpenMP)
- **Applicazione al caso tridimensionale:** nelle simulazioni 3D è possibile osservare le riconessioni dei vortici, perciò diventa importante raffinare il dominio in corrispondenza dei fenomeni che si desidera studiare

Bibilografia

-  S. Zuccher, M. Caliarì, A. W. Baggaley e C. F. Barenghi. “Quantum vortex reconnections”. In: *Physics of Fluids* 24.12 (2012), p. 125108.
-  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.
-  M. Caliarì 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.
-  R.A. Trompert e J.G. Verwer. “A static-regriding method for two-dimensional parabolic partial differential equations”. In: *Applied Numerical Mathematics* 8.1 (1991), pp. 65–90.

Grazie per l'attenzione