Прямая и обратная задача моделирования двумерного бозе-конденсата

Юлия Викторовна Лиханова[1,3],
С.Б. Медведев[1], М.П. Федорук[3,1], П.Л. Чаповский[2,3]

[1]Институт вычислительных технологий СО РАН,
[2]Институт автоматики и электрометрии СО РАН,
[3]Новосибирский государственный университет

Тип задачи	ПЗ	ОЗ1	ОЗ2
Взаимодействия м/у атомами U_0	+	+	+
Частоты ловушки $\omega_x, \omega_y, \omega_z$	+	?	+
Число частиц в конденсате	+	+	?
Размеры (ширины) конденсата Q_x, Q_y, Q_z	?	+	+

Трехмерное уравнение ГП в физических переменных

Для изучения свойств конденсата Бозе—Эйнштейна рассматривается уравнение Гросса—Питаевского

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t) + U_0|\psi(\mathbf{r},t)|^2\psi(\mathbf{r},t), \qquad (1)$$

с нормировкой

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{r},z,t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{r}\mathrm{d}z = \mathrm{N},$$

где $\psi(\mathbf{r},z,t)$, $\mathbf{r}=(x,y)$, — волновая функция конденсата,
$V(\mathbf{r},z)$ — гармонический (или более общий) потенциал ловушки,
$\hbar$ — постоянная планка, m — масса атома, a — длина рассеяния s-волны, $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$ — взаимодействие между атомами,
$\omega_x, \omega_y, \omega_z$ — тактовые частоты в соответствующих направлениях.

Трехмерное уравнение ГП в безразмерных переменных

Вводя новые переменные, можно привести уравнение (1) к безразмерному виду:

$$i\varepsilon\frac{\partial\psi(\mathbf{r},z,t)}{\partial t} = -\frac{\varepsilon^2}{2}\nabla^2\psi(\mathbf{r},z,t)+V(\mathbf{r},z)\psi(\mathbf{r},z,t)+k|\psi(\mathbf{r},z,t)|^2\psi(\mathbf{r},z,t), \tag{2}$$

с ограничением $\int\limits_{\mathbb{R}^3}|\psi(\mathbf{r},z,t)|^2 d\mathbf{r}dz = 1, \quad V(\mathbf{r},z) = \frac{1}{2}\left[x^2+\gamma_y y^2+\gamma_z z^2\right].$

Коэффициенты ε, k уравнения (2) определяются количеством частиц N в конденсате.

Можно сформулировать две задачи:

1) прямая задача нахождения волновой функции конденсата при заданных коэффициентах уравнения (т.е. заданных параметрах удерживающей ловушки и числе частиц);

2) обратная задача нахождения всех коэффициентов уравнения по заданным параметрам конденсата (ширинам, числу частиц).

Редукция к двумерному случаю

Для дископодобного конденсата с частотами $\omega_x \approx \omega_y,\ \omega_z \gg \omega_x, \Leftrightarrow \gamma_y \approx 1, \gamma_y \gg \gamma_z$ $(\mu < \sqrt{\hbar\omega_z})$, решение полного трехмерного уравнения ГП (2) можно представить в виде произведения двух функций

$$\psi(x, y, z, t) = \psi_{2D}(x, y, t)\psi_z(z, t),$$

где

$$\psi_z(z, t) = \frac{\gamma_z^{1/4}}{\pi^{1/4}\varepsilon} \exp(-\gamma_z z^2/2\varepsilon),$$

а $\psi_{2D}(x, y, t)$ находится как решение двумерного уравнения

$$i\varepsilon\frac{\partial\psi_{2D}}{\partial t} = -\frac{\varepsilon^2}{2}\nabla^2\psi_{2D} + V(x, y)\psi_{2D} + k\sqrt{\frac{\gamma_z}{2\pi\varepsilon}}|\psi_{2D}|^2\psi_{2D}, \qquad (3)$$

где $V(x, y) = \dfrac{1}{2}\Big[x^2 + \gamma_y^2 y^2\Big]$.

Математическая модель на основе двумерного уравнения ГП

Рассматривается двумерное уравнение Гросса—Питаевского в безразмерном виде

$$i\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{s}{2}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t) + \sigma|\psi(\mathbf{r},t)|^2\psi(\mathbf{r},t), \qquad (4)$$

где $\psi(\mathbf{r},t)$, $\mathbf{r}=(x,y)$, — волновая функция конденсата, потенциал ловушки

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\gamma_x^2x^2 + \gamma_y^2y^2),$$

с нормировкой

$$\mathcal{N} = \int\limits_{\mathbb{R}^2} |\psi(\mathbf{r},t)|^2\mathrm{d}\mathbf{r} = 1. \qquad (5)$$

(Для сведения этого уравнения к уравнению (3) достаточно провести замену: $t\to t\varepsilon,\ s\to\varepsilon^2,\ \sigma\to k\sqrt{\gamma_z/2\pi\varepsilon},\ \gamma_x\to 1,\ \gamma_y\to\gamma_y$).

Поиск стационарного решения, соответствующего минимуму энергии системы: схема решения

Стационарное решение уравнения (4) будем искать в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) \exp(-i\mu t),$$

где μ — химический потенциал системы, который определяется как

$$\mu[\psi] = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + k_2|\psi(\mathbf{r}, t)|^4\right] \mathrm{d}\mathbf{r} =$$

$$= \mathcal{H}[\psi] + \int\limits_{\mathbb{R}^3} \frac{k_2|\psi(\mathbf{r}, t)|^4}{2} \mathrm{d}\mathbf{r}, \quad \mathcal{H}[\psi] \text{ — гамильтониан системы.}$$

Подставляя это представление в уравнение (4), получаем

$$\mu\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{s}{2}\nabla^2\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) + \sigma|\varphi(\mathbf{r})|^2\varphi(\mathbf{r}),$$

$$\text{с нормировкой} \quad \int\limits_{\mathbb{R}^2} |\varphi(\mathbf{r})|^2 \mathrm{d}\mathbf{r} = 1. \tag{6}$$

Для нахождения стационарного состояния конденсата, соответствующего минимальной энергии системы, применяется следующий численный алгоритм на установление. В уравнении (4) t заменяется на $-it$, а ψ на φ, и затем решение ищется следующим образом.

Сначала на интервале $[t_n, t_{n+1}]$, $n > 0$, численно решается уравнение

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{s}{2}\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}, t) - V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}, t) - \sigma |\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 \varphi(\mathbf{r}, t), \qquad t_n < t < t_{n+1}, \tag{7}$$

затем происходит поправка решения

$$\varphi(\mathbf{r}, t_{n+1}) = \frac{\tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t_{n+1})}{||\tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t_{n+1})||_{L_2}},$$

чтобы удовлетворить ограничению (6). Процесс продолжается до установления.

Вариационная постановка

Для уравнения (4) имеем действие

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{\mathbb{R}^2} \left(\frac{i}{2} \bar{\psi}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{i}{2} \psi(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \bar{\psi}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \right) \mathrm{d}\mathbf{r} - \mathcal{H} \right] dt, \qquad (8)$$

где гамильтониан $\mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}^2} \left[\frac{s}{2} |\nabla \psi(\mathbf{r}, t)|^2 + V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{\sigma}{2} |\psi(\mathbf{r}, t)|^4 \right] \mathrm{d}\mathbf{r}$.

Введем представление

$$\psi(\mathbf{r}, t) = B(\mathbf{r}, t) \exp(i\theta(\mathbf{r}, t)), \qquad (9)$$

где B и θ - вещественные функции. Тогда

$$S = -\int_{-\infty}^{\infty} \left[\int B^2 \frac{\partial \theta}{\partial t} \mathrm{d}\mathbf{r} + \mathcal{H} \right] dt, \quad \mathcal{H} = \int_{\mathbb{R}^2} \left[\frac{s}{2} |\nabla \theta|^2 B^2 + \frac{s}{2} |\nabla B|^2 + V B^2 + \frac{\sigma}{2} B^4 \right] \mathrm{d}\mathbf{r}.$$

Приближенная система

Будем рассматривать потенциал $V(\mathbf{r})$ симметричный относительно отражений от координатных осей, поэтому в представлении функции $\theta(\mathbf{r},t)$ и $B^2(\mathbf{r},t)$ возьмем также симметричные функции. Для фазы возьмем первые члены разложения в ряд Маклорена

$$\theta(\mathbf{r},t) = \theta_0(t) + \theta_x(t)x^2 + \theta_y(t)y^2.$$

Поставляя этот ряд в формулу движения S, получим

$$S = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \left[M_0\frac{\partial\theta_0}{\partial t} + M_x\frac{\partial\theta_x}{\partial t} + M_y\frac{\partial\theta_y}{\partial t} + \mathcal{H}\right] dt, \qquad (10)$$

где M_x, M_y обозначают вторые моменты функции B^2

$$M_x = \int x^2\, B^2\, \mathrm{d}\mathbf{r}, \quad M_y = \int y^2\, B^2\, \mathrm{d}\mathbf{r}, \quad M_0 = \int B^2\, \mathrm{d}\mathbf{r}.$$

Прямая задача

Прямая задача нахождения стационарного состояния состоит в определении стационарного состояния $Q_x = \sqrt{M_x}$, $Q_y = \sqrt{M_y}$ по заданным параметрам задачи: γ_x, γ_y, s, σ. Параметры C_0, C_x, C_y задаются формой пробной функции.

Для нахождения стационарного решения уравнения (4) достаточно в уравнениях движения приравнять нулю производные по времени, т.е. для ширин Q_x и Q_y получаем следующую систему алгебраических уравнений

$$-\gamma_x^2 Q_x + \frac{sC_x}{Q_x^3} + \frac{\sigma}{2}\frac{C_0}{Q_x^2 Q_y}, = 0, \qquad (11)$$

$$-\gamma_y^2 Q_y + \frac{sC_y}{Q_y^3} + \frac{\sigma}{2}\frac{C_0}{Q_x Q_y^2} = 0. \qquad (12)$$

Численно решая эти уравнения для Q_x и Q_y, получим стационарные значения Q_x^{st}, Q_y^{st}. Подставляя эти значения в выбранную пробную функцию, мы и найдем искомое стационарное решение.

Обратная задача: нахождение параметров ловушки

Обратная задача состоит в определение параметров γ_x, γ_y, s, σ по заданным Q_x и Q_y при фиксированном $M_0 = 1$.
Для стационарного решения система (11)-(12) преобразуется к виду

$$\begin{pmatrix} \gamma_x^2 \\ \gamma_y^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{C_1}{Q_x^4} & \dfrac{C_0}{2Q_x^3 Q_y} \\ \dfrac{C_2}{Q_y^4} & \dfrac{C_0}{2Q_x Q_y^3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ \sigma \end{pmatrix} \tag{13}$$

и дает линейную связь между γ_x^2, γ_y^2 и s, σ.
Систему (13) удобно использовать для вычисления параметров ловушки γ_x и γ_y по параметрам уравнения s и σ и ширинам конденсата Q_x и Q_y.

Обратная задача: нахождение параметров уравнения s, σ

Если задать параметры ловушки γ_x, γ_y и ширины конденсата Q_x, Q_y, то параметры s и σ находятся из формул

$$s = \frac{Q_x^2 Q_y^2 \left(\gamma_y^2 Q_y^2 - \gamma_x^2 Q_x^2\right)}{C_2 Q_x^2 - C_1 Q_y^2}, \quad \sigma = 2\frac{Q_x Q_y \left(C_2 \gamma_x^2 Q_x^4 - C_1 \gamma_y^2 Q_y^4\right)}{C_0 \left(C_2 Q_x^2 - C_1 Q_y^2\right)}. \qquad (14)$$

Поскольку мы рассматриваем $s, \sigma > 0$ и считаем, что $\gamma_y \geq \gamma_x$, то имеем условие на соотношение ширин

$$\frac{\gamma_x^2}{\gamma_y^2} \leq \frac{Q_y^2}{Q_x^2} \leq \sqrt{\frac{C_y}{C_x} \frac{\gamma_x}{\gamma_y}}.$$

Минимальное соотношение достигается при условии

$$\gamma_y^2 Q_y^2 = \gamma_x^2 Q_x^2 \quad \text{(соответствует режиму Томаса—Ферми при } s = 0\text{)}.$$

Максимальное соотношение ширин достигается при условии

$$C_y \gamma_x^2 Q_x^4 = C_x \gamma_y^2 Q_y^4 \quad \text{(соответствует линейному режиму при } \sigma = 0\text{)}.$$

Уровень нелинейности

Введем параметр ν для отношения линейной l и нелинейной n частей гамильтониана

$$\nu = \frac{l}{n} = \frac{(\gamma_y^2 Q_y^2 - \gamma_x^2 Q_x^2)(C_y Q_x^2 + C_x Q_y^2)}{2(C_y \gamma_x^2 Q_x^4 - C_x \gamma_y^2 Q_y^4)}. \qquad (15)$$

Эта формула позволяет по положительным параметрам γ_x, γ_y и по положительному уровню нелинейности ν и значению Q_x определить однозначную положительную величину Q_y. Далее по (14) можно определить s и σ (коэффициенты C_0, C_x и C_y определяются из вида пробной функции).
Величина нелинейности диктует выбор пробной функции. Для средней нелинейности $\nu = 1$ в качестве пробной функции выберем гауссову функцию с соответствующими C_0 и C_x. Для сильно нелинейного случая, когда верно приближение Томаса—Ферми, возьмем супергауссову функцию в качестве пробной.

Пробные функции

Функция Гаусса: $\phi(x,y,0)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi Q_x Q_y}}\exp\left(-\dfrac{x^2}{4Q_x^2}-\dfrac{y^2}{4Q_y^2}\right).$

Функция Супер-Гаусс: $\phi(x,y,0)=\sqrt{f_G(x,y)}$, где

$$f_G(x,y)=\frac{1}{4\pi Q_x Q_y}\frac{\Gamma(4k+1)}{\Gamma^2(2k+1)}\exp\left\{-\left(\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{x^2}{Q_x^2}+\frac{y^2}{Q_y^2}\right)\frac{\Gamma(4k+1)}{\Gamma(2k+1)}}\right)^{\frac{1}{k}}\right\},$$

а $k^*=0.28$.

Величины Q_x и Q_y из вариационной постановки в нашем случае соответствуют ширинам в широкоиспользуемом смысле:

$$Q_x=\sigma_x=\sqrt{\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle},\quad Q_y=\sigma_y=\sqrt{\langle(y-\langle y\rangle)^2\rangle},$$

где

$$\langle f(\mathbf{x})\rangle\equiv\int\limits_{\mathbf{X}^2} f(\mathbf{x})|\psi(\mathbf{x},t)|^2\mathrm{d}\mathbf{x}.$$

Сравнение: численный и вариационный подходы

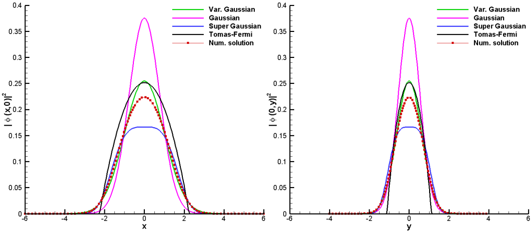

Рис.: Поведение профилей плотности решения $|\psi(x,y)|^2 = |\phi(x,y)|^2$ для среднесильной нелинейности: $(l/n)_G = 1$

Тип решения	$Q_x = \sigma_x$	$Q_y = \sigma_y$	$\mathcal{H}$	μ	Итер.
Вар. Гаусс	1.000	0.625	2.561	3.202	438
Гаусс	0.774	0.548	2.742	3.686	755
Супер—гаусс	0.999	0.638	2.624	3.193	487
Томас—Ферми	0.918	0.459	5.100	5.944	722
Числ. решение	0.996	0.623	2.543	3.158	

Таблица: Среднесильная нелинейность: $\nu = (l/n) = 1$

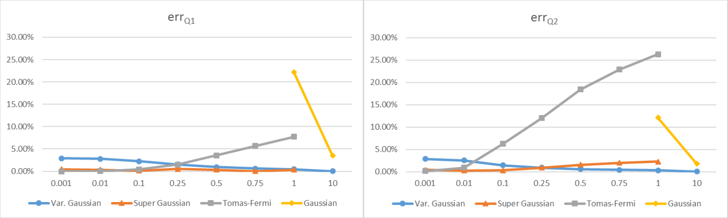

Рис.: Поведение относительной ошибки по ширинам: err_{Q_1} (слева) и err_{Q_2} (справа) при разных параметрах нелинейности

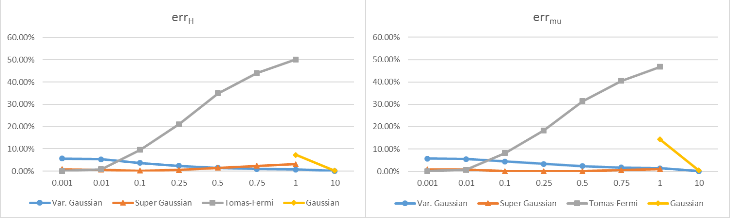

Рис.: Поведение относительной ошибки гамильтониана $err_{\mathcal{H}}$ (слева) и химического потенциала err_{μ} (справа) при разных параметрах нелинейности

Выводы

В рамках вариационного подхода предложен алгоритм, позволяющий решать не только прямую задачу нахождения решения по заданным коэффициентам уравнения, но и обратную задачу восстановления коэффициентов уравнения по некоторым параметрам эксперимента.

Спасибо за внимание!