SCIENTIFIC COMPUTING LABORATORY

Računarski fakultet

Marina Radulaški

Numeričke simulacije rotirajućih Boze-Ajnštajn kondenzata

diplomski rad

mentori:

doc. dr Antun Balaž
Laboratorija za primenu računara u nauci
Institut za fiziku, Beograd

doc. dr Radomir Janković
Računarski fakultet
Univerzitet Union, Beograd

Plan izlaganja

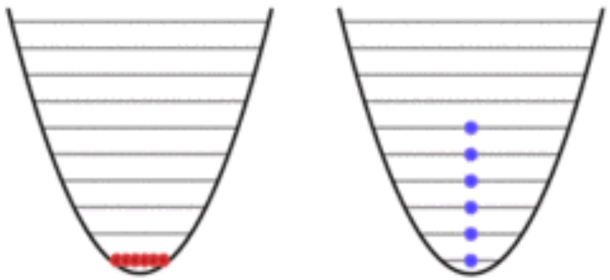
- Uvod
- Numeričke simulacije Boze-Ajnštajn kondenzata
  - Algoritam potpune dijagonalizacije
  - Algoritam Lancoš dijagonalizacije
- Rezultati
- Zaključak

Uvod (1)

- Osnovne saznajne paradigme:
  - eksperiment
  - teorija
  - numeričke simulacije
    - Numerički eksperimenti
    - Proučavanje teorijskih modela
- Numerički algoritmi
  - Implementacija i složenost

Uvod (2)

- Podela elementarnih čestica
  - bozoni
  - fermioni



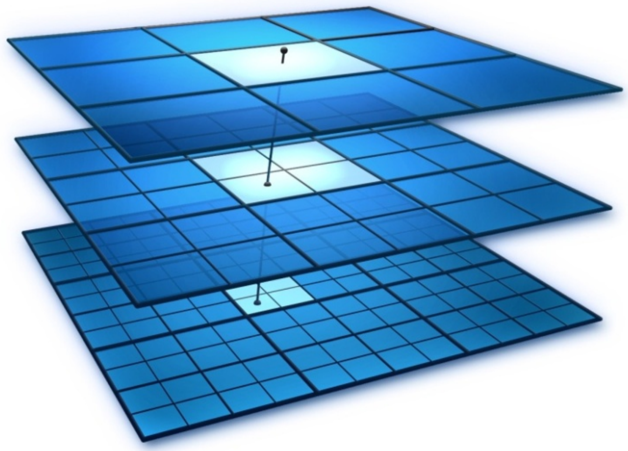
- Fazni prelaz bozona na temperaturama bliskim apsolutnoj nuli – Boze-Ajnštajn kondenzacija
- BAK ^{87}Rb u rotirajućoj magnetno-optičkoj zamci

$$V(x,y,z) = \frac{M}{2}\omega_{\perp}^{2}(1-r^{2})(x^{2}+y^{2}) + \frac{M}{2}\omega_{z}^{2} + \frac{k_{n}}{24}(x^{2}+y^{2})^{2}$$

Numeričke simulacije BAK

- Određivanje T_c zahteva poznavanje spektra teorije
- E_n se mogu dobiti rešavanjem svojstvenog problema matrice A prostorno diskretizovanog evolucionog operatora

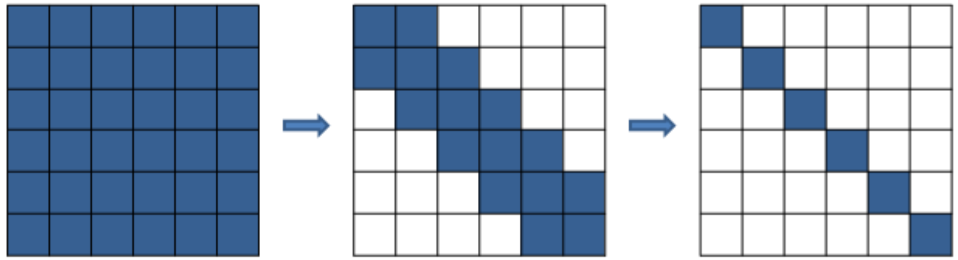
$$Av = \lambda v.$$



- Elementi matrice A se mogu efikasno računati metodom efektivnih dejstava
- Svojstveni problem se može numerički rešiti dijagonalizacijom matrice A

Algoritam potpune dijagonalizacije

- QR dekompozicija
- $A = Z A_D Z^T$

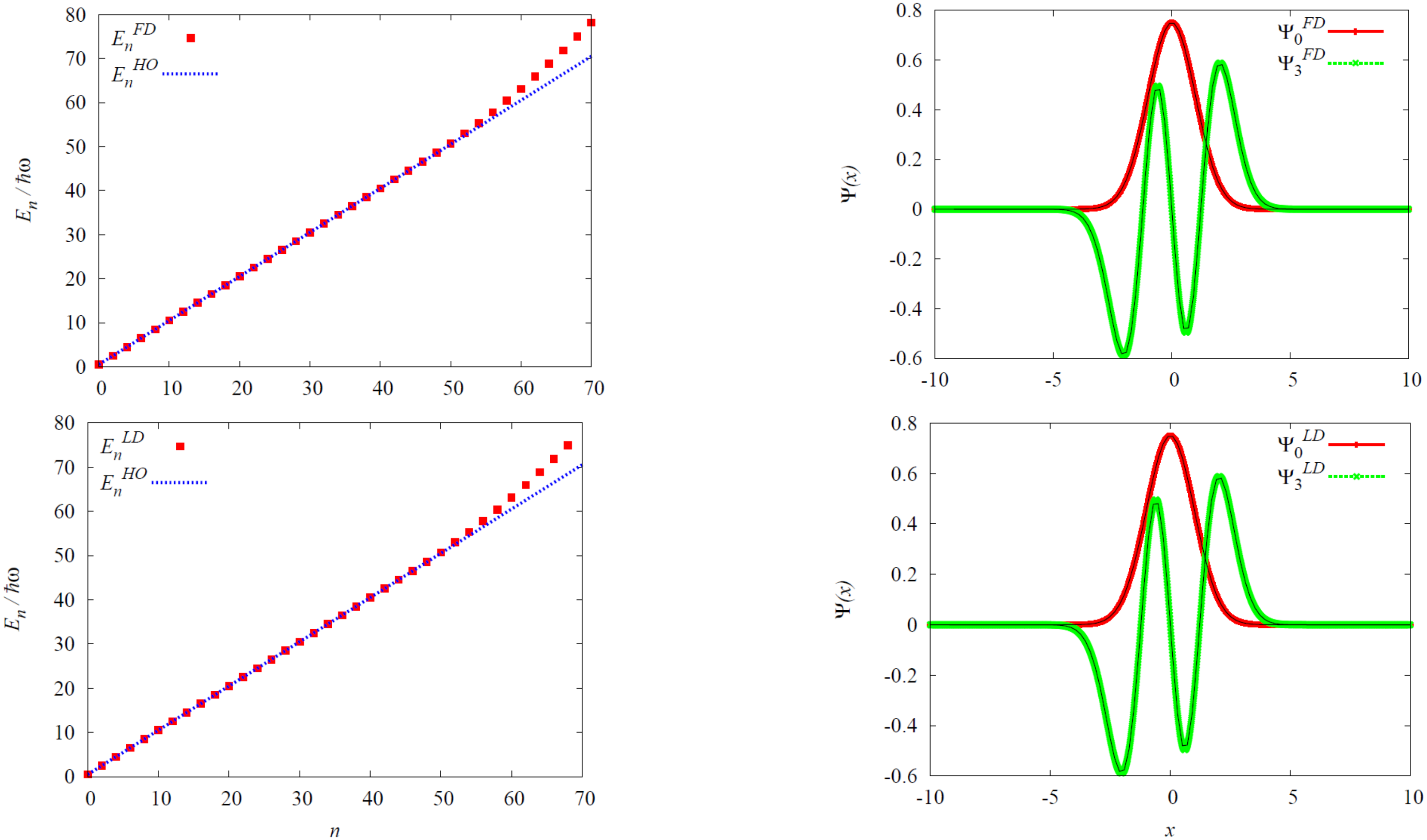


- Određuje egzaktno sve svojstvene vrednosti i vektore (ima ih *D*)
- $\tau^{FD} = O(D^3)$
- $M^{FD} = O(D^2)$

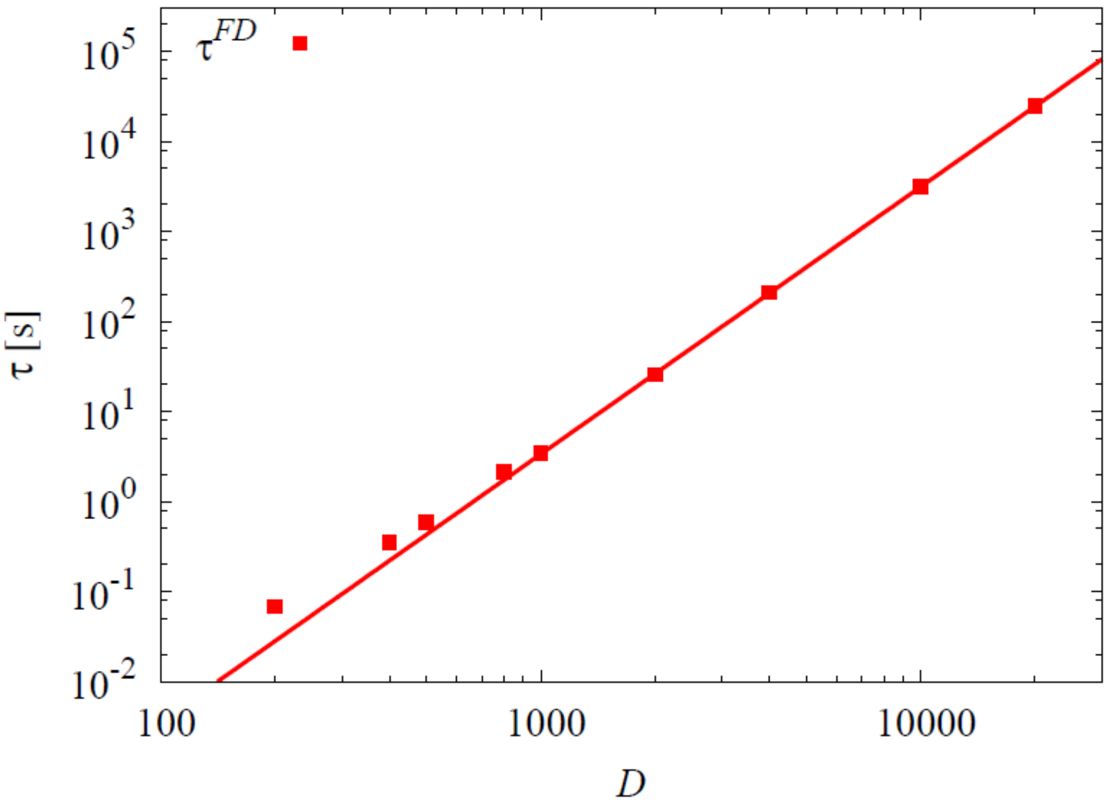
Algoritam Lancoš dijagonalizacije

- Koristi vektore $q_{k+1} = Aq_k$ Krilovljevog potprostora za računanje elemenata tridijagonalne matrice
- Egzaktno određuje traženi broj n_{eig} svojstvenih vrednosti i vektora iterativnom procedurom
- Ne menja matricu tokom iteracija dijagonalizacije, pa matrica ne mora da se čuva u memoriji
- $\tau^{LD} = O(n_{eig}^3 + n_{eig} D^2) \approx O(n_{eig} D^2)$
- $M^{LDm} = O(D^2)$, $M^{LDnm} = O(n_{eig}^2 + n_{eig} D) \approx O(n_{eig} D)$

Rezultati: Sv. vrednosti i vektori



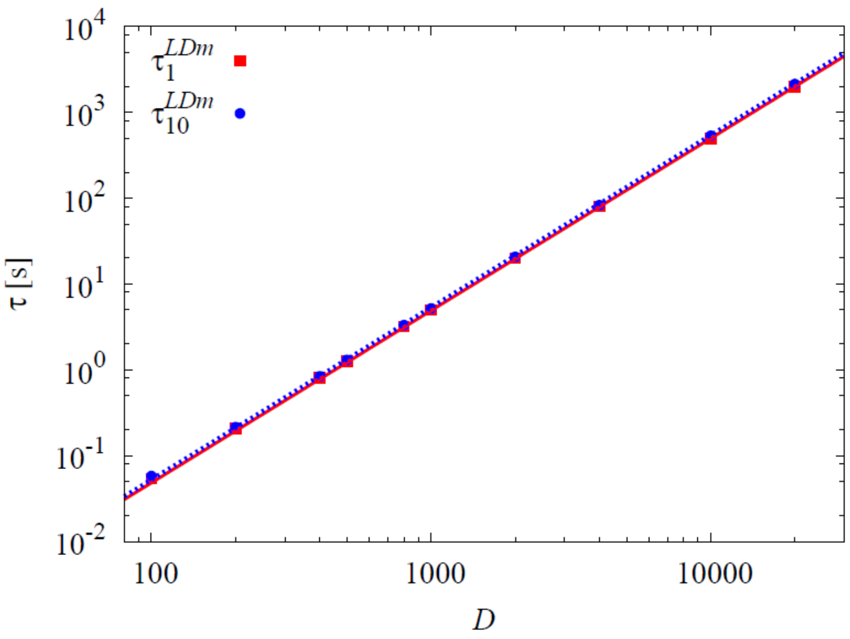
Rezultati: Vremenska složenost FD

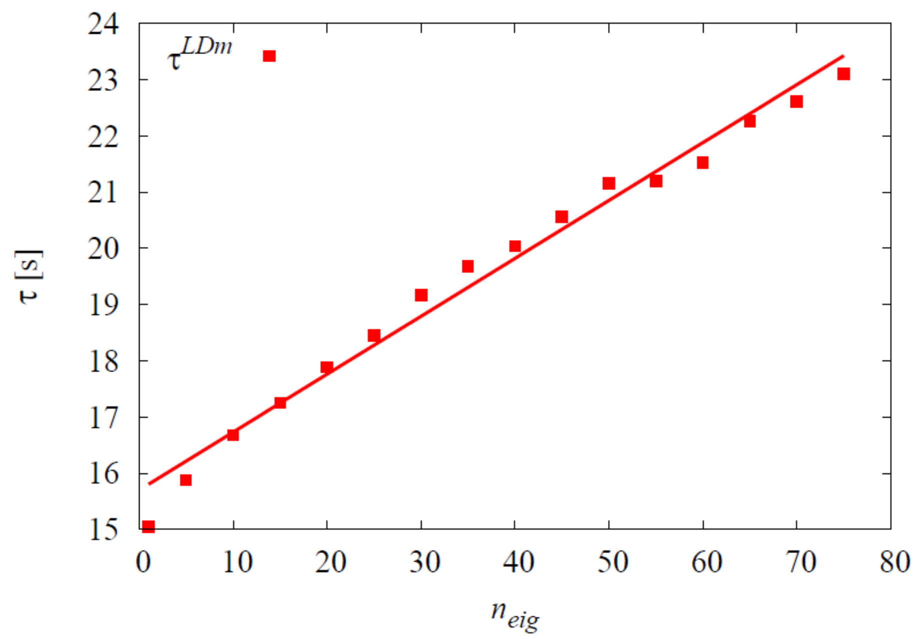


$$\tau^{FD}(D) = 4.13(2) \cdot 10^{-9}\mathrm{s} \cdot D^{2.9704(5)}$$

$$\boxed{\tau^{FD} = O(D^3)}$$

Rezultati: Vremenska složenost LDm



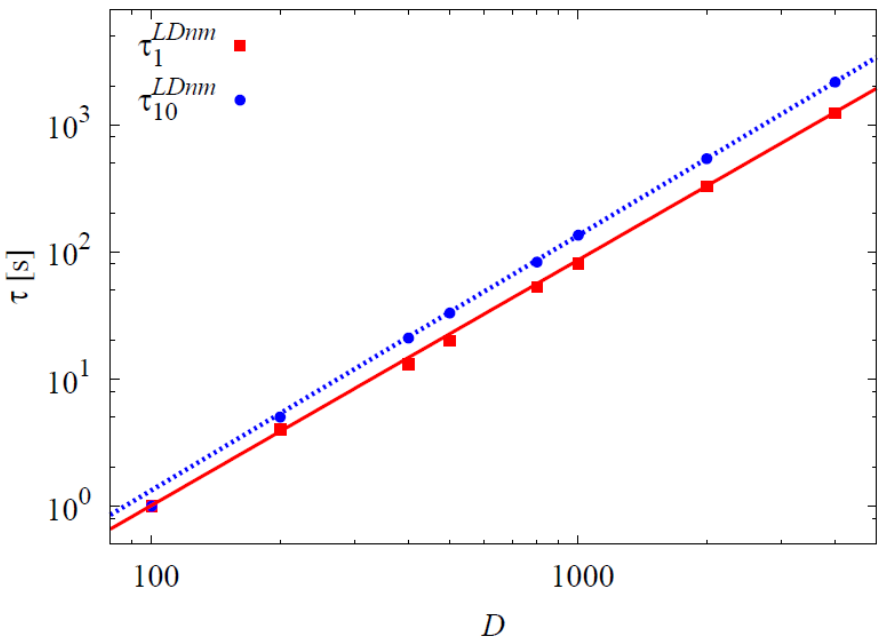


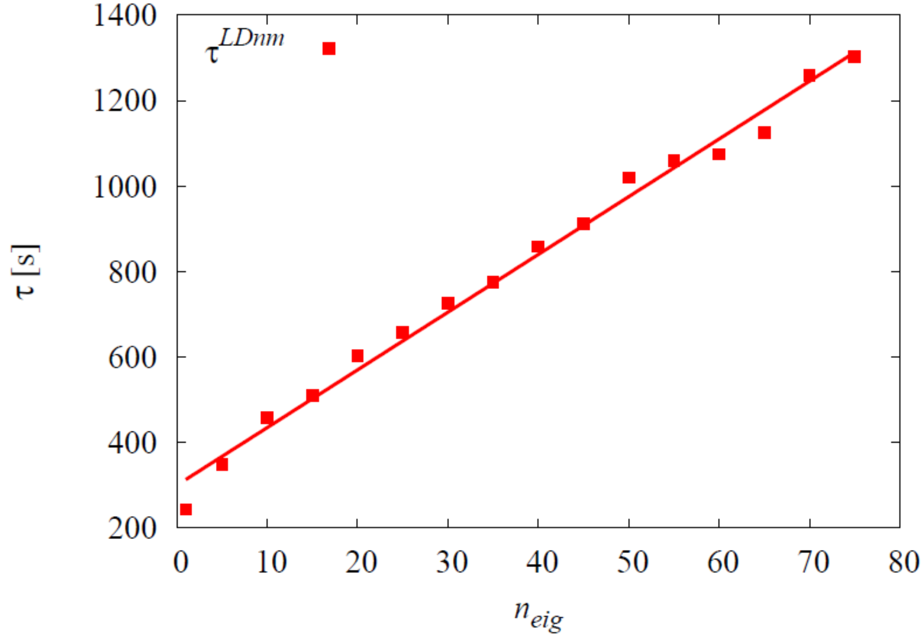
$$\tau^{LDm}_{n_{eig}=1}(D) = 4.7(3)\cdot 10^{-6}\mathrm{s}\cdot D^{2.006(5)}$$

$$\tau^{LDm}(n_{eig}) = 0.103(4)\mathrm{s}\cdot n_{eig} + 15.7(2)\mathrm{s}$$

$$\boxed{\tau^{LD} = O(n_{eig}D^2)}$$

Rezultati: Vremenska složenost LDnm



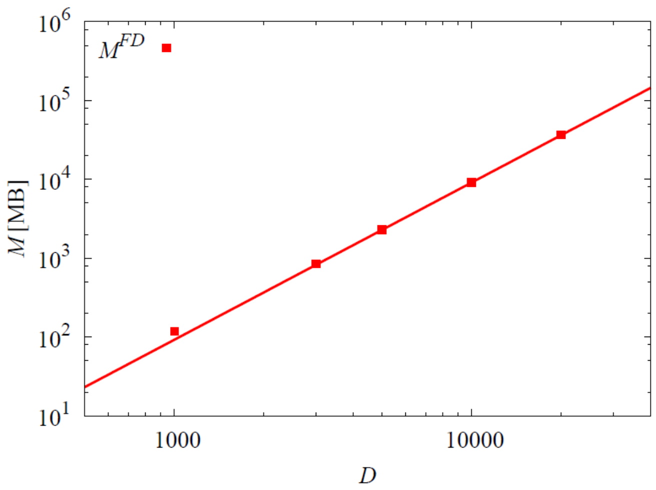


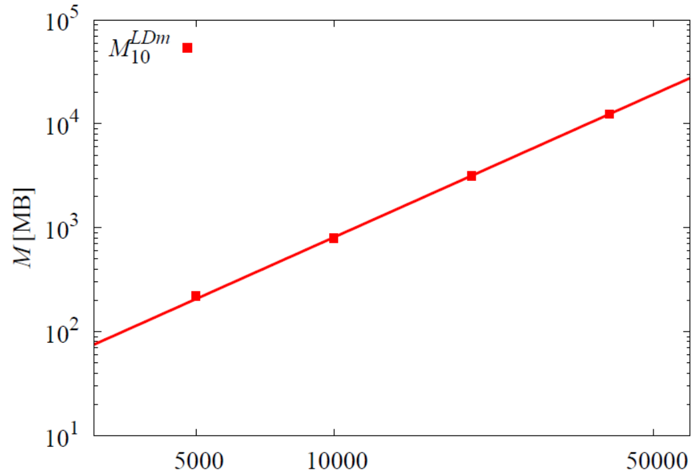
$$\tau^{LDnm}_{n_{eig}=10}(D) = 1.34(3) \cdot 10^{-4}\mathrm{s} \cdot D^{2.004(3)}$$

$$\tau^{LDnm}(n_{eig}) = 13.5(4)\mathrm{s} \cdot n_{eig} + 300(20)\mathrm{s}$$

$$\boxed{\tau^{LD} = O(n_{eig} D^2)}$$

Rezultati: Memorijska složenost



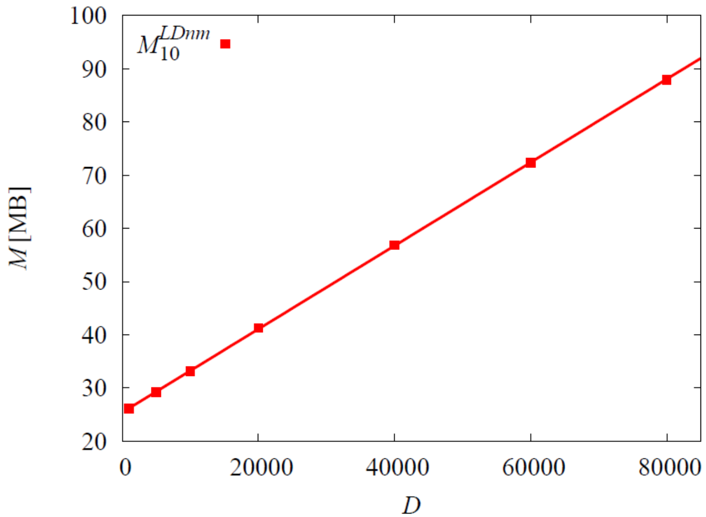


$$M^{FD}(D) = 9.6(3) \cdot\ 10^{-5}\mathrm{MB} \cdot\ D^{1.995(3)}$$

$$M^{LDm}(D) = 1.05(6) \cdot 10^{-5}\mathrm{MB} \cdot\ D^{1.971(6)}$$

$$M^{LDnm}(D) = 7.83(3) \cdot\ 10^{-4}\mathrm{MB} \cdot\ D + 25.4(9)\mathrm{MB}$$

$$\boxed{M^{LDnm} \sim (M^{FD})^{1/2}}$$



SCIENTIFIC COMPUTING LABORATORY

28. decembar 2009.

Računarski fakultet

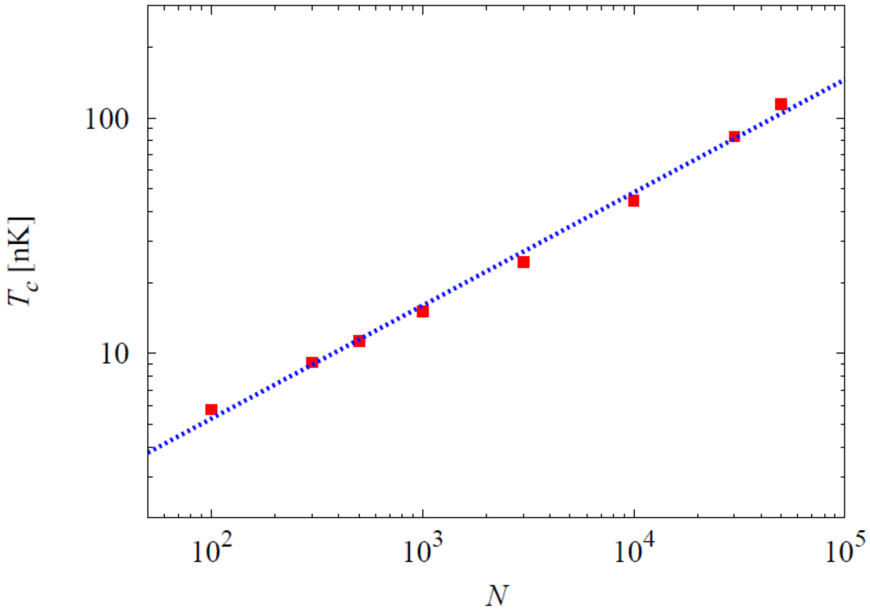
Rezultati: Složenost algoritama

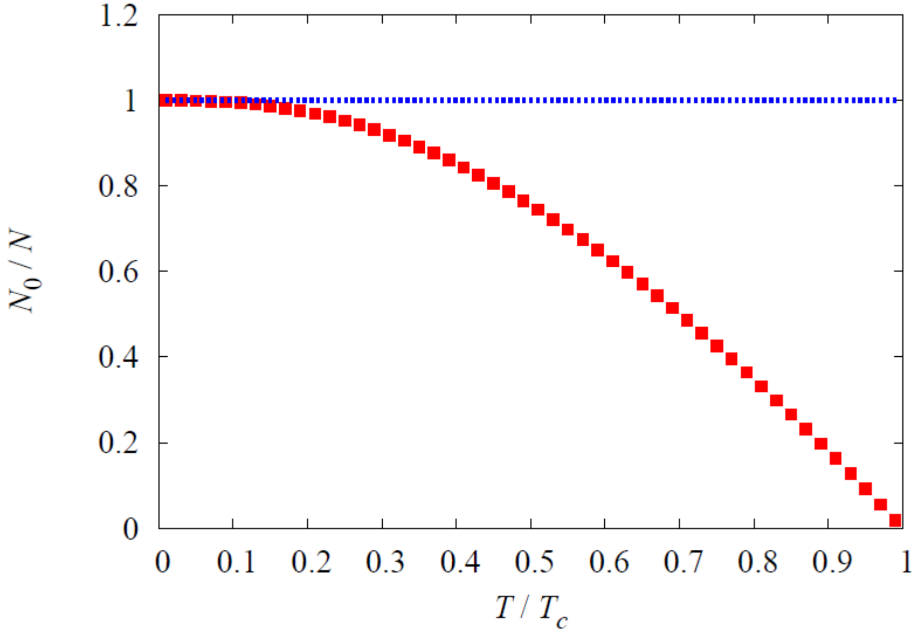
- Ako svaku prostornu koordinatu diskretizujemo u *L* tačaka, dobijamo sledeće kompleksnosti

vremenska kompleksnost τ	$d=1$	$d=2$	$d=3$
algoritam potpune dijagonalizacije (FD)	$O(L^3)$	$O(L^6)$	$O(L^9)$
Lancoš algoritam (LD)	$O(L^2)$	$O(L^4)$	$O(L^6)$

memorijska kompleksnost M	$d=1$	$d=2$	$d=3$
algoritam potpune dijagonalizacije (FD)	$O(L^2)$	$O(L^4)$	$O(L^6)$
Lancoš algoritam sa čuvanjem matrice (LDm)	$O(L^2)$	$O(L^4)$	$O(L^6)$
Lancoš algoritam bez čuvanja matrice (LDnm)	$O(L)$	$O(L^2)$	$O(L^3)$

Rezultati: Globalne osobine BAK

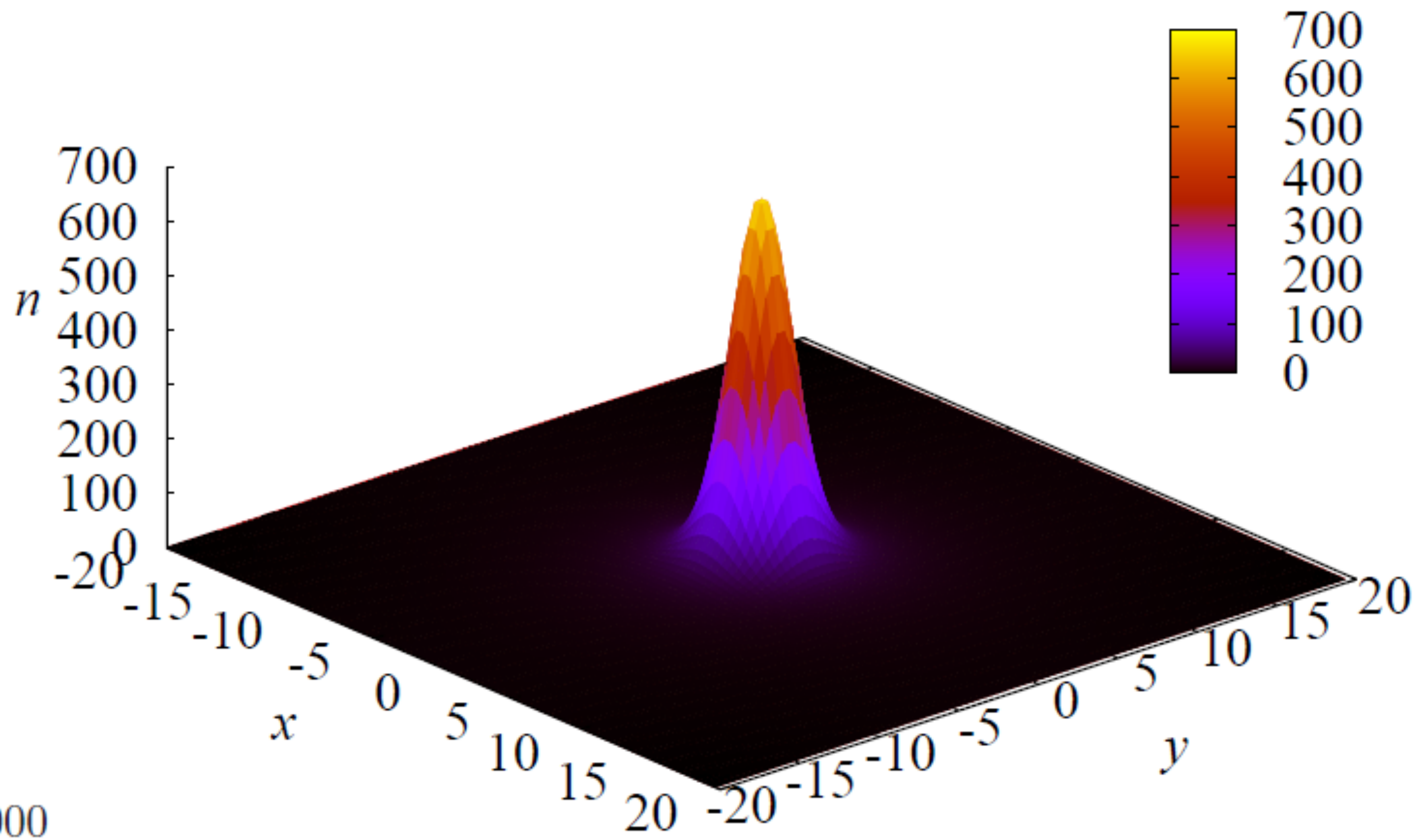




$$T_c(N) = 0.58(6)\mathrm{nK}\cdot\ N^{0.48(2)}$$

$$N = 10000 \qquad T_c = 44.567\ \mathrm{nK}$$

Rezultati: Gustina čestica u BAK



$N = 10000$

$T = 0.01T_c$, $T_c = 44.567\text{nK}$

Zaključak (1)

- Proučavali smo numeričke simulacije rotirajućih Boze-Ajnštajn kondenzata
- Poredili smo preciznost, vremensku i memorijsku kompleksnost standardnog algoritma potpune dijagonalizacije i Lancoš algoritma dijagonalizacije u dve verzije – sa i bez čuvanja matrice koja se dijagonalizuje
- Preciznost algoritama se može smatrati podjednakom

Zaključak (2)

- Kada tražimo mali broj svojstvenih rešenja:
  - vremenska kompleksnost Lancoš algoritma je povoljnija u odnosu na potpunu dijagonalizaciju:

$$\tau^{LD} \sim (\tau^{FD})^{2/3}$$

  - memorijska kompleksnost Lancoš algortima sa čuvanjem matrice je jednaka kompleksnosti algoritma potpune dijagonalizacije, dok Lancoš bez čuvanja matrice dovodi do značajne uštede:

$$M^{LDnm} \sim (M^{FD})^{1/2}$$

Zaključak (3)

- Razvijeni algoritam Lancoš dijagonalizacije smo uspešno primenili na sistem gasa idealnih bozona ^{87}Rb u rotirajućoj magnetno-optičkoj zamci
  - Kondenzaciona temperatura
  - Naseljenost osnovnog stanja
  - Gustina čestica u kondenzatu

Hvala!