HAL
open science

Méthodes numériques avec des éléments finis adaptatifs pour la simulation de condensats de Bose-Einstein

Guillaume Vergez

To cite this version:

Guillaume Vergez. Méthodes numériques avec des éléments finis adaptatifs pour la simulation de condensats de Bose-Einstein. Analyse numérique [math.NA]. Normandie Université, 2017. Français. NNT : 2017NORMR014 . tel-01549272

HAL Id: tel-01549272

https://theses.hal.science/tel-01549272v1

Submitted on 28 Jun 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Normandie Université

THÈSE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Spécialité MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES

Préparée au sein de l'Université de Rouen Normandie

Méthodes numériques avec des éléments finis adaptatifs pour la simulation de condensats de Bose-Einstein

Présentée et soutenue par
Guillaume VERGEZ

Thèse soutenue publiquement le 06/06/2017 devant le jury composé de		
M. Ionut DANAILA	Professeur / Université de Rouen Normandie	Directeur de Thèse
M. Frédéric HECHT	Professeur / Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06	Directeur de Thèse
M. Marc BRACHET	Directeur de Recherche C.N.R.S / École Normale Supérieure	Rapporteur
M. Olivier PANTZ	Professeur / IUT de Nice Sophia-Antipolis	Rapporteur
M. Xavier BLANC	Professeur / Université Paris 7	Examinateur
M. Léo GLANGETAS	Professeur / Université de Rouen Normandie	Examinateur
M. Bartosz PROTAS	Professeur / McMaster University (Canada)	Examinateur

Remerciements

Je tiens à remercier tout d'abord Ionut Danaila et Frédéric Hecht pour le soutien qu'ils m'ont apporté tout au long de ma thèse. Ils ont fait preuve de patience à mon égard et ont su me promulguer les bons conseils pour toujours aller de l'avant. Ils m'ont offert de nombreuses opportunités de m'exprimer en public lors de conférences, parfois à l'internationale, ce qui aura été une expérience très enrichissante.

Un grand merci à Marc Brachet et Olivier Pantz pour avoir accepté de rapporter ma thèse. Merci à Xavier Blanc, Léo Glangetas, Bartosz Protas d'être membres de mon jury lors de ma soutenance.

Merci à l'ANR BECASIM qui a financé ma thèse et m'a permis de rencontrer des chercheurs venus tous horizons. Merci aux chercheurs avec lesquelles j'ai pu interagir tels que Eric Cancés, Weizhu Bao, Qinglin Tang, Xavier Antoine, Christophe Besse, Parimah Kazemi, Rémi Carles, Jean-Marc Sac-Épée, Phillipe Parnaudeau, Alexandre Mouton, Francky Luddens pour les conseils qu'ils m'ont donnés. Merci à Vanessa Lleras pour les travaux que nous avons menés ensemble et à Geneviève Dusson pour la collaboration très motivante que nous avons initiée. Merci à Bartosz Protas pour son invitation à l'institut Fields à Toronto où j'ai appris tant de choses.

Merci à Pierre Calka pour son attitude chaleureuse et bienveillante à chacune de mes venues au LMRS. Merci à tous les doctorants du LMRS pour les moments agréables en leur compagnie, notamment lors de la préparation de "Ma thèse au LMRS en 180 secondes" ou de la SEME. Merci aussi à Paul Raynaud de Fitte pour l'organisation de "Ma thèse au LMRS en 180 secondes" qui a été très instructive.

Merci à Xavier Claeys et Benjamin Stamm du LJLL pour m'avoir confié les TP de MM0031. Encadrer ces TP m'a beaucoup apporté et appris, notamment en C++. Quel beau métier, professeur !

Spéciale dédicace à la team des doctorants du bureau 15-16-221 qui a égayé les heures de bureau. Une pensée pour Juliette et Sylvain que je n'ai connus que trop peu. Je n'oublierai surtout pas les discussions interminables avec Malik, l'accent formidable de Ludo bucheron-san, les moments de détente avec JP, les concertos surprises de Giaccomo, le gros son de Casimir, les délires de Shuyang, la conversation de Florian, l'appétit de Chang Yu et la discrétion de Carlos. J'espère bien rester ami avec vous tous.

Carlo et Philippe, merci de m'avoir motivé à faire de l'escalade pour maintenir ma forme mais surtout pour votre amitié et votre soutien dans les moments difficiles.

Un grand merci à tous les doctorants du LJLL et plus particulièrement Thibault pour ses soirées folles et Dena et Sarah pour leur conversation intéressante.

Merci à toute la bande des anciens d'Orsay, Malek, Nils, Marion, Lucie et Adrien, Marie-Noëlle et Raphaëlle, Lucile et Clément, Sébastien, Laure et Hélian, pour tous ces moments de détente, de joie et de partage entre amis et pour les vacances géniales passées ensemble.

Merci à mes amis les plus anciens et les plus chers qui m'ont soutenu et motivé quand j'en avais le plus besoin et depuis bien longtemps. Joaquim, Aude, Aurélien, Flore, Maxime, François, Ridha, Iseult, Nicolas, Lucie, Morgane vous êtes à jamais dans mon cœur. Quel émoi

m'habite ! J'aurais trop de choses à écrire pour vous exprimer ma gratitude, il me faudrait un rapport de thèse complet sur le sujet.

Merci à l'Afrique, berceau de l'humanité, sans qui rien de tout cela n'aurait été. L'Afrique restera t-elle encore longtemps dans l'attente de cette lutte passive ?

Un énorme merci à ma petite Océane qui a bien grandi au fur et à mesure que cette thèse murissait. Elle a su égayer toutes mes journées et soirées par ses sourires et ses jeux radieux d'enfant. Elle apporte la vie et la joie partout où elle passe. Merci aussi pour la patience dont elle a fait preuve, rare chez un enfant, alors que son papa travaillait ou se reposait.

Merci à mes parents et ma grande sœur pour leur soutien sans faille. Je n'ai pas de mot pour leur exprimer ma reconnaissance. De même qu'à toute ma famille en général de la Picardie à la Réunion en passant par les Landes.

Enfin, merci à tous ceux que j'ai pu oublier ! ! !

Guillaume Vergez

Lundi 29 mai 2017

Table des matières

1. Introduction 1
   1.1. Phénomène physique : Le condensat de Bose-Einstein . . . 1
   1.2. Objectif de la thèse . . . 3
      1.2.1. Méthodes numériques existantes . . . 4
      1.2.2. Objectifs de la thèse . . . 6
   1.3. Organisation du mémoire . . . 7

2. Modèle de Gross-Pitaevskii 9
   2.1. Énergie et équation de Gross-Pitaevskii . . . 9
   2.2. Réduction de dimension . . . 11
   2.3. Adimensionnement . . . 13

3. Calcul d'états stationnaires de l'équation de Gross-Pitaevskii 17
   3.1. Construction de l'état initial pour la minimisation de l'énergie de Gross-Pitaevskii 19
      3.1.1. Approximation de Thomas-Fermi . . . 19
      3.1.2. Solution dans le cas sans rotation et solution axisymétrique . . . 20
      3.1.3. Construction de vortex dans le champ initial . . . 22
   3.2. Minimisation de l'énergie avec une méthode de gradient de Sobolev . . . 24
      3.2.1. Formulation de la méthode . . . 24
      3.2.2. Adaptation de maillage . . . 27
   3.3. Minimisation de l'énergie avec la bibliothèque d'optimisation Ipopt . . . 29
      3.3.1. Algorithme utilisé pour incorporer l'adaptation de maillage . . . 31
      3.3.2. Comparaison avec la méthode de gradient de Sobolev . . . 31
   3.4. GPFEM, une toolbox d'éléments finis . . . 36
      3.4.1. Description des programmes . . . 36
      3.4.2. Résultats obtenus en 2D et en 3D et interface utilisateur . . . 38
   3.5. Conclusion . . . 44

4. Résolution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps 45
   4.1. Schémas en temps de type splitting . . . 47
      4.1.1. Schéma de splitting de Lie-Trotter . . . 47
      4.1.2. Schéma de splitting de Strang . . . 49
   4.2. Schéma de relaxation . . . 50
   4.3. Validation des schémas . . . 51
      4.3.1. Cas test 1 : Sans rotation avec un potentiel de piégeage anisotrope . . . 52
      4.3.2. Cas test 2 : Avec rotation, dans un potentiel de piégeage isotrope . . . 55
      4.3.3. Cas test 3 : Avec rotation, dans un potentiel de piégeage anisotrope . . . 57
   4.4. Adaptation de maillage et conservation de la masse . . . 60
   4.5. GPFEM-inst, une toolbox éléments finis pour la résolution de l'équation instationnaire . . . 60
      4.5.1. Description des programmes . . . 60
      4.5.2. Stabilité d'un vortex central dans un condensat sans rotation en 2D . . . 62

4.5.3. Dynamique d'un réseau de vortex en 2D perturbé par un agitateur gaussien 65
4.5.4. Instabilité d'un vortex central de charge deux dans un condensat sans rotation en 3D . . . 67
4.6. Conclusion . . . 69

5. Résolution numérique du modèle de Bogoliubov-de Gennes 71
5.1. Modèle de Bogoliubov-De Gennes . . . 71
5.1.1. Linéarisation de l'équation de Gross-Pitaevskii . . . 71
5.1.2. Adimensionnement . . . 73
5.1.3. Caractéristiques des modes de Bogoliubov . . . 75
5.2. Méthode de Newton et librairie ARPACK . . . 75
5.2.1. Construction de l'état stationnaire avec la méthode de Newton . . . 75
5.2.2. Construction des modes de Bogoliubov . . . 77
5.3. Application 1D : soliton noir . . . 77
5.4. Application en 2D : état avec un vortex simple . . . 81
5.5. Conclusion . . . 85

6. Conclusion et perspectives 87

A. Calcul détaillé de l'approximation de Thomas-Fermi (section 3.1.1) 89
A.1. Forme générale . . . 89

B. Construction d'un maillage ellipsoïdal en 3D avec FreeFem++ 97

C. Description de la toolbox GPFEM 101

Bibliography 107

1. Introduction

Cette introduction est consacrée à définir la problématique de cette thèse. Dans un premier temps, nous nous intéressons au condensat de Bose-Einstein. Nous décrivons ce système physique tout en rappelant l'historique des principales avancées qui y sont liées. Puis, nous décrivons les objectifs de cette thèse et exposons un historique des méthodes numériques ayant permis la simulation du condensat de Bose-Einstein. Enfin, nous présentons l'organisation de ce mémoire.

1.1. Phénomène physique : Le condensat de Bose-Einstein

La condensation de Bose-Einstein est un phénomène issu de la physique quantique et plus particulièrement de l'étude des atomes froids. Ce phénomène a été prédit pour la première fois par Albert Einstein en 1925 (Einstein, 1925). Ce dernier avait généralisé aux atomes froids, un résultat obtenu pour les photons par Satyendranath Bose (Bose, 1924). L'idée de Bose était que la statistique classique de Maxwell-Boltzmann ne peut pas s'appliquer aux photons. Ces derniers sont en effet soumis à des phénomènes quantiques tels que le principe d'incertitude d'Heisenberg : on ne peut connaître simultanément la vitesse et la position des particules massiques. De plus, les photons ont la propriété d'être indiscernables lorsqu'ils sont au même niveau d'énergie. Alors que la statistique classique donne la vitesse des particules d'un gaz parfait soumis à des interactions élastiques, la nouvelle statistique de Bose permet de connaître la répartition des vitesses des particules dans l'espace des phases. C'est un des fondements de la physique quantique statistique qui a vu le jour. Einstein a ensuite généralisé ce résultat aux atomes froids et prédit que si l'on considère un gaz dilué de particules, il existe une température critique T_c en dessous de laquelle un changement de phase s'effectue et une partie des atomes se met dans l'état fondamental de plus faible énergie. C'est cette fraction du gaz que l'on appelle condensat de Bose-Einstein. La température critique T_c peut être déterminée par un argument d'analyse dimensionnelle (Pethick and Smith, 2002) :

$$T_C = \frac{3.3\hbar^2 n^{\frac{2}{3}}}{mk_B}$$

où $\hbar$ est la constante de Planck réduite, k_B est la constante de Boltzmann, n est le nombre d'atomes par unité de volume et m est la masse d'un atome. Les atomes dans le condensat oscillent en suivant tous la même fonction d'onde complexe ψ. La longueur d'onde d'oscillation des atomes est alors comparable à la distance qui les sépare. Les effets quantiques dans le gaz apparaissent lorsque la longueur d'onde de de Broglie λ_B est atteinte (de Broglie, 1925). La formule suivante donne un lien entre λ_B et la température :

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}.$$

A l'époque de la prédiction d'Einstein, il n'existait aucun moyen d'atteindre des températures suffisamment basses et on ne connaissait pas de bon candidat pour réaliser un condensat de

Bose-Einstein. En 1938, Allen et Misener (Allen and Misener, 1938) et Kapitza (Kapitza, 1938) découvrent une propriété étonnante de l'hélium ^{4}He. Lorsqu'on le refroidit, il passe à l'état liquide et y reste jusqu'à des températures très basses. De plus, en dessous de $2.17K$ une transition de phase apparaît et la viscosité est très faible. Ce phénomène est appelé superfluidité. London fait alors un lien entre la superfluidité de l'hélium et la condensation de Bose-Einstein (London, 1938). Mais seulement 10% des atomes de l'hélium superfluide sont dans l'état fondamental et les interactions sont fortes, alors que la condensation de Bose-Einstein est prédite pour un gaz parfait, dilué, où les interactions sont faibles. Les travaux sur la compréhension de l'hélium superfluide et les concepts physiques développés ont pu être appliqués plus tard au condensat de Bose-Einstein. Des prédictions sur l'existence de tourbillons (vortex) quantiques dans le superfluide sont faites par Onsager en 1949 (Onsager, 1949) et Feynman en 1955 (Feynman, 1955). Cela fut confirmé par une expérience de Hall and Vinen en 1956 (Hall and Vinen, 1956) et une observation directe de Packard and Sanders en 1972 (Packard and Sanders, 1972). La fonction d'onde du superfluide peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\psi(t,x,y,z) = \sqrt{\rho(t,x,y,z)}e^{iS(t,x,y,z)},$$

où ρ est la densité atomique locale et S la phase. La vitesse locale en un point de densité non nulle est définie par analogie avec des fluides classiques, comme

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar}{m}\nabla S.$$

Par un calcul simple on constate que $\nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times \nabla S$ est nul sauf aux points où S est discontinu. On en déduit que le superfluide est irrotationnel sauf aux points où la densité est nulle ou la phase irrégulière. Alors, un tourbillon (ou vortex) quantique est caractérisé par le fait que ρ est nul en son sein et par l'existence d'un flux superfluide sans friction autour de lui, avec un champ de phase discontinu. La circulation autour du vortex sera alors

$$\Gamma = \oint \mathbf{v}.dl = n\frac{h}{m}.$$

Ici $n \in \mathbb{Z}$ est la charge du vortex. Il correspond au nombre de discontinuités de la phase et quantifie le vortex.

Un bon candidat pour la réalisation du condensat de Bose-Einstein est suggéré par Hecht en 1959 (Hecht, 1959) : il s'agit de l'atome d'hydrogène avec un spin polarisé. L'idée est validée par Stwalley et Nosanov en 1976 (Stwalley and Nosanov, 1976). Il s'ensuit une course à la réalisation du condensat de Bose-Einstein. En 1987, Greytak et Kleppner (Hess et al., 1987) découvrent une méthode pour refroidir un gaz d'hydrogène jusqu'à $10^{-3}K$, par confinement du gaz dans un piège magnétique puis évaporation des atomes les plus chauds. Une grande avancée a lieu grâce la mise au point de la technique de refroidissement des atomes par laser dans les années 1980 par le français Claude Cohen-Tannoudji et les américains William Phillips et Steven Chu. Ceci leur a valu le Prix Nobel de 1997 et ouvert la voix à la réalisation du premier condensat de Bose-Einstein en 1995. E. A. Cornell et Carl E. Wieman de l'Université du Colorado réalisèrent un condensat avec des atomes de Rubidium ^{87}Rb (Anderson et al., 1995) alors que l'équipe de W. Ketterle (MIT) réalisa un condensat avec des atomes de Sodium ^{33}Na (Davis et al., 1995). Ils furent tous les trois récompensés par le Prix Nobel de 2001. Le premier condensat d'atomes d'hydrogène fut réalisé plus tard, en 1998 (Fried et al., 1998). Depuis, d'autres expériences ont été menées et il a notamment été prouvé que le condensat a un comportement de superfluide en mettant en évidence certaines propriétés. En 1999, la présence de courants permanents dans

le condensat lorsqu'il est stimulé par un rayon laser a été montrée (Raman et al., 1999). En 2000 et 2001, il a été montré que des vortex quantiques sont nucléés dans le condensat en rotation (Madison et al., 2000a, 2001; Abo-Shaeer et al., 2001). Le condensat est confiné dans un piège magnétique et mis en rotation à l'aide d'un rayon laser. Comme la rotation solide n'est pas possible dans le superfluide, le condensat peut soit rester au repos, soit nucléer des vortex quantiques. Les vortex commencent à apparaître quand la fréquence de rotation Ω dépasse un seuil critique Ω_c. Quand on augmente $\Omega > \Omega_c$, de plus en plus de vortex apparaissent et on obtient un réseau de Abrikosov (illustré par la figure 1.1).

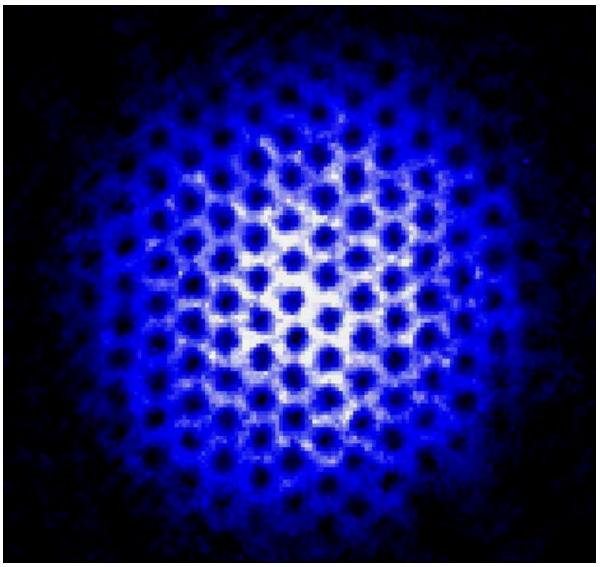


FIGURE 1.1.: Réseau d'Abrikosov avec des vortex quantiques dans un condensat de Bose-Einstein. Expériences réalisées au JILA, University of Colorado (http://jilawww.colorado.edu).

1.2. Objectif de la thèse

Nous souhaitons développer des méthodes numériques et réaliser des codes informatiques permettant d'étudier les propriétés physiques du condensat de Bose-Einstein. Parmi les différents modèles permettant de décrire le condensat de Bose-Einstein (Avdeenkov and Zloshchastiev, 2011; Kolomeisky et al., 2000; Salasnich et al., 2002), nous avons choisi d'étudier l'équation de Gross-Pitaevskii. Ce modèle est le plus fréquemment rencontré dans la littérature physique et fut élaboré simultanément par Gross (Gross, 1961) et Pitaevskii (Pitaevskii, 1961). On retrouve une analyse du modèle dans (Pitaevskii and Stringari, 2003). Dans les 40 années qui ont suivis son élaboration, de nombreux travaux ont été consacrés à son étude mathématique. Notamment, E. H. Lieb, M. Loss, R. Seiringer et J. Yngvason ont étudié la validité du modèle et démontré l'existence et l'unicité de solutions (Lieb et al., 2000; Lieb and Loss, 2001; Lieb et al., 2005).

Il faut différencier deux principaux modèles qui feront intervenir des méthodes numériques et une philosophie très différentes : le cas stationnaire d'un condensat dans un état fondamental ou méta-stable et le cas instationnaire d'un condensat dont l'état évolue au cours du temps. Un

troisième modèle concerne l'étude de la stabilité d'un état stationnaire par rapport à de faibles perturbations et en observant ensuite son évolution au cours du temps. Dans ce cas, le modèle de Bogoliubov-de Gennes (de Gennes, 1999) est le plus fréquemment utilisé. Il consiste en une linéarisation de l'équation de Gross-Pitaevskii instationnaire autour d'un état stationnaire.

La principale difficulté dans l'étude numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii, réside dans son caractère non linéaire. Il est nécessaire d'élaborer des méthodes complexes, demandant un temps de calcul parfois important. La mise en rotation du condensat de Bose-Einstein pose une difficulté supplémentaire, car apparaissent alors des vortex. Ces derniers sont de petite taille par rapport aux dimensions du condensat. Nous sommes donc confrontés à deux échelles de résolution différentes. Il est alors courant de faire appel à des discrétisations spatiales précises (méthodes spectrales ou des différences finies d'ordre élevé), pour calculer et représenter le condensat en rotation. Nous montrons dans cette thèse que les éléments finis d'ordre peu élevé (un ou deux) peuvent fournir une précision de calcul équivalente si le maillage est correctement adapté pour suivre les différentes échelles spatiales de la solution.

1.2.1. Méthodes numériques existantes

Équation de Gross-Pitaevskii stationnaire. La principale difficulté dans la résolution de cette équation réside dans la non-linéarité. Pour répondre à cela, de nombreuse méthodes ont été élaborées et il faut en distinguer deux types.

1. Diverses méthodes se basent sur le concept de propagation en temps imaginaire de la solution :
   - un schéma d'Euler semi-implicite est étudié par Antoine and Duboscq (2014); Aftalion and Du (2001); Bao and Du (2004); Bao and Shen (2008) ;
   - un schéma de Crank-Nicolson est utilisé dans les travaux de Muruganandam and Adhikari (2009) ;
   - un schéma de Runge-Kutta d'ordre quatre est construit dans Caplan (2013) ;
   - un schéma de Crank-Nicolson combiné à un schéma de Runge-Kutta se retrouve dans les recherches de Aftalion and Danaila (2003, 2004); Danaila (2005) ;
   - un schéma de splitting de Strang est développé dans Aftalion and Du (2001); Bao and Du (2004).
2. À cela s'ajoutent les méthodes de minimisation directe de l'énergie :
   - une méthode de diagonalisation itérative est élaborée par Tiwari and Shukla (2006) ;
   - un algorithme d'amortissement optimal est étudié dans les travaux de Dion and Cancès (2007); Hohenester (2014) ;
   - des méthodes de type Newton avec une recherche linéaire sont construites dans Caliari and Rainer (2013); Vudragović et al. (2012); Wu et al. (2017) ;
   - des méthodes de descente de gradient sont étudiées dans García-Ripoll and Pérez-García (2001a); Kazemi and Eckart (2009); Danaila and Kazemi (2010).

Les méthodes de discrétisation spatiale sont diverses pour répondre au souci de finesse de maille lié à la présence de vortex. Nous distinguons trois types de discrétisation : spectrale, différences finies ou éléments finis.

1. Parmi les méthodes de type spectrale, nous trouvons :
   - des décompositions de type Fourier dans Dion and Cancès (2007); Antoine and Duboscq (2014); García-Ripoll and Pérez-García (2001b,a); Zeng and Zhang (2009) ;
   - l'utilisation de fonctions de Hermite dans les recherches de Caliari and Rainer (2013) ;

- une méthode spectrale sinusoïdale dans les travaux de Bao and Du (2004); Bao et al. (2006a) ;
- une méthode pseudo-spectrale de Laguerre-Hermite dans Bao and Shen (2008).

2. En ce qui concerne les discrétisations en différences finies, nous rencontrons :
   - des différences finies standards dans les travaux de Muruganandam and Adhikari (2009); Vudragović et al. (2012); Hohenester (2014) ;
   - des schémas compacts (différences finies d'ordre 4) dans Caplan (2013) ;
   - des schémas compacts (différences finies d'ordre 6) dans les recherches de Aftalion and Danaila (2003, 2004); Danaila (2005).
3. Pour les discrétisations de type éléments finis citons :
   - une discrétisation hybride de Galerkin discontinue basée sur des polynômes et des ondes planes développée dans Farhat and Toivanen (2012) ;
   - une discrétisation de type éléments finis standards sur des maillages fixes dans les travaux de Aftalion and Du (2001); Bao and Tang (2003); Bao and Du (2004); Baksmaty et al. (2009) ;
   - une discrétisation de type éléments finis standards sur des maillages adaptés dynamiquement à l'état stationnaire dans Danaila and Hecht (2010), mais seulement pour des configurations 2D.

Nous explorons ce dernier type de discrétisation spatiale dans notre travail de recherche. Nous nous sommes appuyés sur les méthodes existantes et notamment sur l'adaptation de maillage que nous avons étendue en 3D.

Équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps. L'évolution en temps réel du condensat nécessite d'utiliser des méthodes de résolution très différentes. Nous en avons classées certaines, présentées dans la littérature scientifique, en fonction de la discrétisation en espace utilisée.

1. Pour une discrétisation spatiale de type différences finies, nous trouvons les méthodes suivantes :
   - le schéma de Crank-Nicolson utilisé dans Guo (1986); Bao and Cai (2012, 2013b); Chang et al. (1999, 1995); Glassey (1992) ;
   - le schéma en temps semi-implicite proposé dans Bao and Cai (2013a, 2012, 2013b) ;
   - le schéma, utilisant des différences finies d'ordre deux en temps, dans les travaux de Durán and Sanz-Serna (2000); Robinson et al. (1993); Sanz-Serna (1984, 1986) ;
   - le schéma de relaxation de Besse (2004) ;
   - les schémas de splitting en temps dans Bao and Cai (2013a); Bao et al. (2013b); Bao and Tang (2014); Wang (2005) ;
   - les schémas, utilisant des différences finies d'ordre 4, dans les recherches de Wang (2011); Liao et al. (2010); Xie et al. (2009).
2. Pour des discrétisations de type spectral, de nombreuses méthodes ont été développées :
   - le principe de splitting en temps présent dans les travaux de Bao et al. (2003a, 2002, 2003b); Besse et al. (2002); Lubich (2008); Gauckler and Lubich (2010); Neuhauser and Thalhammer (2009); Shen and Wang (2013); Antoine and Duboscq (2015) ;
   - les schémas de splitting en temps d'ordre très élevé dans Bao and Shen (2005); Bao and Zhang (2005); Thalhammer (2008, 2012); Chin and Chen (2001a,b) ;
   - le schéma de relaxation dans Antoine and Duboscq (2015) ;
   - les méthodes adaptées spécifiquement à la présence de la rotation se retrouvant dans Bao and Cai (2013a,b); Bao and Wang (2006); Bao et al. (2006b, 2009, 2013a); Caradoc-Davies et al. (1999); Saito and Ueda (2001) ;
   - le changement de repère via des coordonnées lagrangiennes en rotation utilisé dans García-Ripoll et al. (2001); P.Antonelli et al. (2012); Bao et al. (2013a).

3. La discrétisation spatiale de type éléments finis est très peu représentée :
   - une méthode de Galerkin en espace combinée à un schéma de Crank-Nicolson en temps est utilisée dans Akrivis et al. (1991) ;
   - des éléments finis en deux dimensions d'espace associés à une méthode de Runge-Kutta en temps sont développés dans Akrivis and Dougalis (1991).

Dans nos travaux, nous reprenons les schémas de time-splitting et de relaxation précédemment évoqués et nous utilisons une discrétisation spatiale de type éléments finis.

Modèle de Bogoliubov-de Gennes. Pour l'étude de la stabilité d'un état stationnaire, il y a deux problèmes à résoudre : l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire et le système aux valeurs et vecteurs propres de Bogoliubov-de Gennes. Les méthodes numériques développées utilisent souvent une méthode de type Newton pour calculer l'état stationnaire (Baksmaty et al., 2009; Bisset et al., 2015). Pour la résolution du problème aux valeurs et vecteurs propres, des bibliothèques externes sont utilisées. Citons par exemple **SLEPc** (Hernandez et al., 2005) utilisée dans Baksmaty et al. (2009) ou **Arpack** (R. B. Lehoucq, 1997) que l'on retrouve dans Middelkamp et al. (2010a); Modugno et al. (2003). La discrétisation la plus fréquemment utilisée est de type spectrale (Middelkamp et al., 2010a; Modugno et al., 2003; Castin and Dum, 1999; Bisset et al., 2015), mais on trouve une discrétisation de type éléments finis dans Baksmaty et al. (2009). En nous basant sur une discrétisation en éléments finis, nous utilisons une méthode de Newton pour calculer l'état stationnaire et la librairie Arpack (R. B. Lehoucq, 1997) interfacée avec FreeFem++ pour la résolution du problème aux valeurs et vecteurs propres.

1.2.2. Objectifs de la thèse

Nous avons utilisé dans ces travaux le logiciel d'éléments finis FreeFem++ (Hecht et al., 2007) pour améliorer des méthodes existantes ou en développer de nouvelles. Ce logiciel, facile d'utilisation, est basé sur le langage informatique C++. Il possède son propre langage interne, proche de la formulation variationnelle des équations aux dérivées partielles (EDP). Grâce à l'interface avec une multitude de librairies et à un mailleur intégré, il offre un grand nombre de possibilités pour résoudre numériquement des EDP. Il permet, notamment, d'utiliser des discrétisations en éléments finis P_1 ou en éléments finis d'ordre plus élevé pour des problèmes en deux dimensions ou en trois dimensions d'espace.

Pour l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire, nos objectifs ont été les suivants :

(i) reprendre l'algorithme de descente basé sur la méthode de gradient de Sobolev présenté dans Danaila and Kazemi (2010) et testé pour des configuration 2D dans Danaila and Hecht (2010) ; l'améliorer en ajoutant une recherche linéaire optimale du pas de descente et en explorant des configurations 3D ; la principale difficulté est la construction d'un bon maillage en 3D ;

(ii) développer et implémenter une nouvelle méthode de minimisation pour des configurations 2D et 3D en se basant sur la librairie d'optimisation Ipopt (Wächter, 2002) qui utilise une méthode de point intérieur ; une difficulté est d'inclure l'adaptation de maillage dans le processus d'utilisation d'Ipopt ;

(iii) étendre à des configurations 3D, l'adaptation de maillage (présentée dans Danaila and Hecht (2010) pour des configurations 2D) en utilisant les fonctions d'adaptation de maillage anisotrope fournies par les logiciels **mshmet** (C. Dapogny and Frey, 2014) et **mmg3d** (Dobrzynski and Frey, 2012) ; une complication rencontrée a été de borner l'anisotropie pour ne pas

avoir de mailles trop allongées ;

(iv) réaliser une toolbox utilisant le logiciel FreeFem++ et rassemblant les méthodes développées pour des configurations 2D et 3D, avec pour but d'être distribuée auprès de physiciens et mathématiciens ; elle doit être facile d'utilisation et s'adapter à des différentes configurations mathématiques ou physiques.

Pour l'équation de Gross-Pitaevskii instationnaire, nos objectifs ont été les suivants :

(i) étudier les méthodes de time-splitting et de relaxation présentées, par exemple, dans (Bao and Cai, 2013a; Besse, 2004) ; les adapter à une discrétisation en éléments finis, et les implémenter en utilisant le logiciel FreeFem++ ; il est nécessaire, de part l'utilisation des éléments finis, de combiner les schémas de time-splitting avec un schéma de Crank-Nicolson ;

(ii) vérifier l'ordre de convergence et le bon comportement des méthodes sur des cas tests connus en 2D ; tester l'adaptation de maillage pour ces méthodes ;

(iii) tester les méthodes sur des cas plus compliqués en 2D présentant de nombreux vortex et explorer des configurations en 3D ; l'utilisation d'éléments finis P_2 est nécessaire pour obtenir des simulations précises et la gestion de la mémoire en 3D représente une difficulté surmontée par l'utilisation d'un super calculateur (HPC) ;

(iv) rassembler les méthodes développées dans une toolbox utilisant le logiciel FreeFem++, facile d'utilisation et s'adaptant à diverses configurations physiques ou mathématiques.

Pour le modèle de Bogoliubov-de Gennes, nos objectifs ont été les suivants :

(i) élaborer une méthode de Newton pour construire l'état stationnaire étudié ; utiliser ensuite le logiciel FreeFem++ et la librairie Arpack (R. B. Lehoucq, 1997) pour calculer les solutions du système de Bogoliubov-de Gennes ; pour obtenir des résultats précis, il est nécessaire d'utiliser des éléments finis P_2 ;

(ii) tester cette méthode sur des cas tests en 1D et 2D et comparer les résultats à ceux présentés dans les articles de physique ;

(iii) fournir un code qui permet de résoudre le système de Bogoliubov-de Gennes numériquement.

1.3. Organisation du mémoire

Le chapitre 2 expose le modèle de Gross-Pitaevskii. Dans un premier temps, nous introduisons l'énergie de Gross-Pitaevskii pour un condensat en rotation. Ensuite, nous décrivons l'équation de Gross-Pitaevskii instationnaire et en dérivons l'équation stationnaire. De plus, nous proposons une méthode pour réduire le problème à une ou deux dimensions. Enfin, nous présentons une mise à l'échelle générale qui permet d'obtenir la forme adimensionnée des équations.

Le chapitre 3 présente les méthodes de résolution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire avec rotation. Nous abordons des méthodes qui minimisent directement la fonctionnelle d'énergie de Gross-Pitaevskii. Tout d'abord, nous présentons la construction des approximation de la condition initiale avec trois approches : le modèle de Thomas-Fermi, l'utilisation de

l'axisymétrie, et la suppression de la rotation. Puis, une méthode de descente de type gradient de Sobolev adaptée spécifiquement à la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire est exposée. Ensuite, une méthode utilisant la librairie Ipopt (J. Nocedal and Waltz, 2008; Wächter, 2002; Wächter and Biegler, 2006) est présentée. Ces procédés ont été implémentées avec le logiciel FreeFem++ (Hecht et al., 2007) et testées sur des exemples connus. Une discrétisation en éléments finies P_1 ou P_2 a été utilisée ainsi qu'une méthode d'adaptation de maillage par contrôle de la métrique (Borouchaki et al., 1996; C. Dapogny and Frey, 2014; Danaila and Hecht, 2010). On montre leur bon fonctionnement sur des exemples en 2 dimensions et en 3 dimensions d'espace. Une toolbox munie d'une interface utilisateur simple a été réalisée et permet de lancer facilement ces exemples. On décrit son fonctionnement et son utilisation.

Le chapitre 4 est consacré à l'étude de schémas en temps pour la résolution du problème d'évolution. Le logiciel FreeFem++ a encore une fois été utilisé pour avoir une discrétisation spatiale en éléments finies P_1 et P_2. En premier lieu, des schémas de time-splitting d'ordre 1 et 2 munies d'une discrétisation en temps semi-implicite de type Crank-Nicolson ont été implémentés (Strang, 1968; Bao and Zhang, 2005; Bao et al., 2006b; Antoine et al., 2013; Antoine and Duboscq, 2015). Ensuite, un schéma de relaxation présent dans (Besse, 2004; Antoine et al., 2013; Antoine and Duboscq, 2015) a été étudié. Après avoir décrit ces schémas, nous montrons leur ordre de convergence sur des exemples simples et comparons leur performance avec le cas d'une discrétisation spatiale spectrale. Nous les utilisons ensuite pour résoudre une configuration complexe en 2D avec plusieurs vortex et une configuration en 3D.

Le chapitre 5 est consacré à la résolution numérique du modèle de Bogoliubov-de Gennes. Nous dérivons le modèle en linéarisant l'équation de Gross-Pitaevskii instationnaire. Puis, nous décrivons la méthode utilisée avec le logiciel FreeFem++ et la librairie **ARPACK** (R. B. Lehoucq, 1997) pour résoudre ce problème de valeurs et vecteurs propres. Nous utilisons des éléments finis P_2 pour des configurations en une ou deux dimensions d'espace. Enfin, nous vérifions le bon fonctionnement de la méthode en comparant les résultats obtenus à ceux présentés dans des articles de physique.

Les conclusion et perspectives décrivent les objectifs atteints au cours de nos travaux de recherche et proposent des ouvertures à partir des sujets abordés.

Les annexes contiennent des descriptions techniques. La première contient les formules analytiques pour l'approximation de Thomas-Fermi. La seconde présente la construction avec le logiciel FreeFem++ d'un maillage ellipsoïdal dont la forme est proche de celle d'un condensat allongé. La troisième décrit les fichiers de la toolbox distribuée pour résoudre numériquement les équations de Gross-Pitaevskii stationnaire et instationnaire.

2. Modèle de Gross-Pitaevskii

Dans ce chapitre, nous nous concentrons sur la description du modèle de Gross-Pitaevskii pour un condensat de Bose-Einstein en rotation. Son nom provient de son élaboration simultanée par Gross (Gross, 1961) et Pitaevskii (Pitaevskii, 1961). Tout d'abord, nous écrivons l'énergie du modèle dans le cas où la rotation est présente. Nous en dérivons les équations instationnaire et stationnaire. Ensuite, nous réduisons le problème en trois dimensions à un problème en une ou deux dimensions. Enfin, nous proposons un adimensionnement général pour ces équations, utilisé dans le reste du rapport.

2.1. Énergie et équation de Gross-Pitaevskii

On considère un condensat de Bose-Einstein constitué de N atomes confinés dans un potentiel de piégeage V_{trap} et tournant avec la vitesse $\mathbf{\Omega}$. L'énergie de Gross-Pitaevskii (GP) est donnée par :

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + V_{\text{trap}} |\psi|^2 + \frac{1}{2} g |\psi|^4 - \psi^* \mathbf{\Omega} \cdot \mathcal{L}(\psi) \right) d\mathbf{x} \tag{2.1.1}$$

où ψ est la fonction d'onde du condensat, ψ^* est son conjugué complexe, m est la masse atomique, $\hbar$ est la constante de Planck réduite et g est le coefficient d'interaction défini par :

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}, \text{ avec } a_s \text{ la longueur de diffusion.} \tag{2.1.2}$$

V_{trap} est le potentiel magnétique de piégeage qui a souvent la forme harmonique :

$$V_{\text{trap}}(x, y, z) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2), \tag{2.1.3}$$

avec ω_x, ω_y et ω_z les fréquences de piégeage dans chaque direction spatiale. On verra plus tard d'autres exemples de potentiels de piégeage.

L'impulsion $\mathcal{P}(\psi)$ et le moment cinétique $\mathcal{L}(\psi)$ sont définis par :

$$\mathbf{P}(\psi) = -i\hbar\nabla\psi \quad \text{et} \quad \mathcal{L}(\psi) = \mathbf{x} \times \mathbf{P}(\psi). \tag{2.1.4}$$

Dans la suite nous considérons toujours des rotations autour de l'axe des z pour simplifier. De plus, c'est le cas dans la plupart des expériences effectuées dans le laboratoire Kastler Brossel de l'École Normale Supérieure (Madison et al., 2000b,a, 2001) ou celles de Ketterle (Abo-Shaeer et al., 2001; Raman et al., 2001). On prend donc $\mathbf{\Omega} = \Omega\mathbf{k}$ où $\mathbf{k}$ est les vecteur directeur unitaire de l'axe des z. Il s'en suit que seule la composante z du moment cinétique apparaît dans (2.1.1) :

$$\mathbf{\Omega} \cdot \mathcal{L}(\psi) = \Omega \mathcal{L}_z(\psi) = i\hbar\Omega \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right),$$

que l'on préfèrera écrire sous la forme :

$$\Omega \mathcal{L}_z(\psi) = i\hbar\Omega\, \mathbf{A}^t\, \nabla\psi, \quad \text{avec} \quad A^t = (y, -x, 0).$$

Finalement, l'énergie peut se réécrire sous la forme :

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi|^2 + V_{\text{trap}}\, |\psi|^2 + \frac{1}{2} g |\psi|^4 \right) d\mathbf{x} - \Omega L_z,$$

où le moment angulaire L_z est exprimé comme :

$$L_z = i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \psi^* \mathbf{A}^t\, \nabla\psi\, d\mathbf{x}.$$

Le nombre d'atomes dans le condensat N est conservé, ce qui se traduit mathématiquement par le fait que la norme L^2 de la fonction d'onde est constante.

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x})|^2\, d\mathbf{x} = N. \tag{2.1.5}$$

L'état fondamental ψ_g est alors défini comme le minimum global de l'énergie de Gross-Pitaevskii, sous la contrainte de conservation du nombre d'atomes :

$$\psi_g = \min_{\|\psi\|_{L^2}=N} \mathcal{E}(\psi).$$

Les minima locaux dont l'énergie est supérieure à celle de l'état fondamental sont appelés états excités ou méta-stables.
L'énergie (2.1) peut aussi s'écrire sous une autre forme qui sera utile dans la suite pour la construction de schémas numériques :

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left| \nabla\psi + i\frac{m\Omega}{\hbar}\, A\, \psi \right|^2 + V_{\text{trap}}^{\text{eff}}\, |\psi|^2 + \frac{1}{2} g |\psi|^4 \right) d\mathbf{x}, \tag{2.1.6}$$

où le potentiel de piégeage effectif est corrigé par un terme centrifuge :

$$V_{\text{trap}}^{\text{eff}} = V_{\text{trap}} - \frac{1}{2} m\Omega^2 r^2, \quad r^2 = x^2 + y^2. \tag{2.1.7}$$

Une autre forme utile de l'énergie est le grand potentiel (ou énergie libre) du système :

$$\Xi = \mathcal{E}(\psi) - \mu N = \mathcal{E}(\psi) - \mu \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2\, d\mathbf{x}, \tag{2.1.8}$$

où $\mu \in \mathbb{R}$ est le potentiel chimique du condensat. Pour rechercher des points critiques du grand potentiel, on le dérive au sens de Fréchet pour obtenir l'équation d'Euler-Lagrange ($\delta\Xi = 0$) associée au problème de minimisation. Cette équation est appelée équation de Gross-Pitaevskii stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V_{\text{trap}}\psi + g|\psi|^2\psi - i\hbar\Omega(\mathbf{A}^t\, \nabla)\psi = \mu\psi. \tag{2.1.9}$$

L'état fondamental et les états excités sont des solutions de ce problème aux valeurs et vecteurs propres non linéaire. Les états excités ont une énergie supérieure à celle de l'état fondamental.
L'équation de Gross-Pitaevskii décrivant la propagation en temps réel de la fonction d'onde est :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V_{\text{trap}}\psi + g|\psi|^2\psi - i\hbar\Omega(\mathbf{A}^t\, \nabla)\psi. \tag{2.1.10}$$

Il est intéressant de considérer dans l'équation (2.1.10) une fonction d'onde de la forme :

$$\psi = \phi \exp(-i\mu t/\hbar).$$

On obtient alors encore une fois l'équation (2.1.9) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + V_{\text{trap}}\phi + g|\phi|^2\phi - i\hbar\Omega(\mathbf{A}^t\nabla)\phi = \mu\phi.$$

2.2. Réduction de dimension

La forme en trois dimensions du condensat de Bose-Einstein piégé dans un potentiel harmonique $V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) = \sum_{i=x,y,z}\frac{1}{2}m\omega_i^2$ est déterminée par les rapports entre les trois fréquences de piégeage $\omega_x, \omega_y, \omega_z$, chaque fréquence étant liée à la longueur d'un oscillateur harmonique $a_{\text{ho}}^j = \sqrt{\hbar/(m\omega_j)}$, $j \in \{x, y, z\}$. Lorsque le condensat a une forme de cigare très allongé on peut réduire l'équation de Gross-Pitaevskii à une unique dimension d'espace. Lorsque le condensat est très aplati et a une forme de disque, on peut réduire l'équation de Gross-Pitaevskii à deux dimensions d'espace.

- **Condensat 1D.** Considérons un condensat piégé dans un potentiel présentant une symétrie radiale $\omega_x = \omega_y = \omega_\perp$. En notant $a_{ho} = \sqrt{\hbar/(m\omega_\perp)}$ on obtient une forme de cigare quand $a_{\text{ho}} < a_{\text{ho}}^z$, *i. e.* $\omega_\perp > \omega_z$. Un condensat réduit à une dimension d'espace est alors obtenu lorsque $a_{\text{ho}} \ll a_{\text{ho}}^z$, *i. e.* $\omega_\perp \gg \omega_z$. Si on définit, comme dans Frantzeskakis (2010), le rapport donnant l'aspect du potentiel :

$$\delta_z = \frac{\omega_z}{\omega_\perp}, \tag{2.2.1}$$

un condensat en 1D est obtenu quand

$$d = N\delta_z\frac{a_s}{a_\perp} \ll 1. \tag{2.2.2}$$

On peut décomposer, dans ce cas, la fonction d'onde 3D comme :

$$\psi_{3d}(\mathbf{x}, t) = \Phi_{2d}(\mathbf{r})\psi_{1d}(z, t), \tag{2.2.3}$$

$\Phi_{2d}(\mathbf{r})$ est l'état fondamental de l'oscillateur harmonique transverse :

$$\Phi_{2d}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi^{1/2}a_\perp}\exp\left(-\frac{r^2}{2a_\perp^2}\right), \quad \int_0^{+\infty}\int_0^{2\pi}\Phi_{2d}^2\, r dr d\theta = 1, \tag{2.2.4}$$

avec $[r, \theta]$ les coordonnées polaires dans le plan horizontal. Pour ces coordonnées, les opérateurs deviennent $\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ et $\mathbf{A}^t\nabla = -\frac{\partial}{\partial\theta}$.
En injectant $\psi = \psi_{3d}$ dans (2.1.10) et en utilisant la conservation de la masse (2.1.5) on obtient alors l'équation de Gross-Pitaevskii 1D :

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{1d}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{1d}}{\partial z^2} + (V_{\text{trap}} + \kappa)\psi_{1d} + g_{1d}|\psi_{1d}|^2\psi_{1d}, \tag{2.2.5}$$

où

$$\begin{aligned}\kappa =& \int_{\mathbb{R}}\left[\frac{m}{2}\omega_\perp^2 r^2|\Phi_{2d}|^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Phi_{2d}^*}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\Phi_{2d}}{\partial r}\right)\right] r dr d\theta \\ =& \hbar\,\omega_\perp,\end{aligned}$$

$$g_{1d} = g\int_0^{+\infty}\int_0^{2\pi} \Phi_{2d}^4\, r dr d\theta = \frac{g}{2\pi a_\perp^2} = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m}\frac{m\omega_\perp}{2\pi\hbar} = 2a_s(\hbar\omega_\perp), \tag{2.2.6}$$

et

$$V_{\text{trap}}(z) = \frac{1}{2}m\omega_z^2 z^2. \tag{2.2.7}$$

Finalement, en effectuant le changement de jauge $\psi_{1d}(z,t) \to \psi_{1d}(z,t)e^{-i\omega_\perp t}$ on peut supprimer κ dans l'équation précédente et obtenir l'équation de propagation en temps réel :

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{1d}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_{1d}}{\partial z^2} + V_{\text{trap}}\psi_{1d} + g_{1d}|\psi_{1d}|^2\psi_{1d}, \tag{2.2.8}$$

La conservation du nombre d'atomes reste inchangée :

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi_{1d}(z,t)|^2\, dz = N_{1d} = \frac{N}{\int_{\mathbb{R}^2} |\Phi_{2d}(\mathbf{r})|^2\, dxdy} = N. \tag{2.2.9}$$

L'énergie du système est décrite par la fonctionnelle :

$$\mathcal{E}(\psi_{1d}) = \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\left|\frac{\partial\psi_{1d}}{\partial z}\right|^2 + V_{\text{trap}}\,|\psi_{1d}|^2 + \frac{1}{2}g_{1d}|\psi_{1d}|^4\right) dz. \tag{2.2.10}$$

- **Condensat 2D.** Une réduction du modèle 3D vers un modèle 2D peut être faite quand $a_{\text{ho}} \gg a_{\text{ho}}^z$, *i. e.* $\omega_\perp \ll \omega_z$ comme dans (Bao and Tang, 2003) et (Bao and Cai, 2013a). Le condensat est alors plus confiné dans la direction z et a forme de disque. Si on définit, comme dans (Middelkamp et al., 2010a), le rapport donnant l'aspect du condensat par :

$$\delta_\perp = \frac{\omega_\perp}{\omega_z} = \frac{1}{\delta_z}, \tag{2.2.11}$$

un condensat en 2 dimensions est obtenu quand

$$\delta_\perp \ll 1, \text{ et } \mu \ll \hbar\omega_z. \tag{2.2.12}$$

Suivant (Dalfovo et al., 1999; Bagnato et al., 2015) et (Jackson et al., 1998), la fonction d'onde 3D peut être factorisée en :

$$\psi_{3d}(t,x,y,z) = \psi_{2d}(t,x,y)\psi_3(z), \text{ avec } \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_3(z)|^2\, dz = 1. \tag{2.2.13}$$

On peut définir

$$\psi_3(z) = \left(\int_{\mathbb{R}^2} |\psi_0(x,y,z)|^2\, dxdy\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{2.2.14}$$

avec ψ_0 l'état stationnaire du condensat en 3D. En injectant $\psi = \psi_{3d}$ dans (2.1.10) et en utilisant la conservation de la masse (2.1.5), on obtient alors l'équation en temps réel :

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{2d}}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{2d} + (V_{\text{trap}} + \kappa)\psi_{2d} + g_{2d}|\psi_{2d}|^2\psi_{2d} - i\hbar\Omega(\mathbf{A}^t\,\nabla)\psi_{2d},$$

où

$$\kappa = \int_{\mathbb{R}} (\frac{m}{2}\omega_z^2 z^2|\psi_3(z)|^2 + \frac{\hbar^2}{2m}|\partial_z\psi_3(z)|^2)dz,$$

$$g_{2d} = \int_{\mathbb{R}} g|\psi_3(z)|^4 dz$$

et

$$V_{\text{trap}}(r) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2). \tag{2.2.15}$$

En effectuant le changement de jauge $\psi_{2d}(t,x,y) \to \psi_{2d}(t,x,y)e^{-i\frac{\kappa}{\hbar}t}$, on peut supprimer κ dans l'équation précédente et obtenir

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{2d}}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi_{2d} + V_{\text{trap}}\,\psi_{2d} + g_{2d}|\psi_{2d}|^2\psi_{2d} - i\hbar\Omega(\mathbf{A}^t\,\nabla)\psi_{2d}. \tag{2.2.16}$$

La conservation du nombre d'atomes devient :

$$\int_{\mathbb{R}^2} |\psi_{2d}(t,x,y)|^2\,dxdy = \frac{N}{\int_{\mathbb{R}} |\psi_3(z)|^2\,dz} = N. \tag{2.2.17}$$

L'énergie du système est :

$$\mathcal{E}(\psi_{2d}) = \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi_{2d}|^2 + V_{\text{trap}}\,|\psi_{2d}|^2 + \frac{1}{2}g_{2d}|\psi_{2d}|^4\right)\,dxdy - \Omega L_z, \tag{2.2.18}$$

où le moment angulaire L_z est exprimé comme :

$$L_z = i\hbar\int_{\mathbb{R}^3} \psi_{2d}^*\mathbf{A}^t\,\nabla\psi_{2d}\,dxdy. \tag{2.2.19}$$

Suivant (Bao and Cai, 2013a), pour de petites constantes d'interaction g, on peut choisir $\psi_3(z)$ comme l'état fondamental de l'oscillateur harmonique dans la direction z :

$$\psi_3(z) = \frac{1}{\pi^{1/4}(a_{\text{ho}}^z)^{1/2}}\exp\left(-\frac{z^2}{2(a_{\text{ho}}^z)^2}\right). \tag{2.2.20}$$

On peut alors calculer

$$g_{2d} = g_{3d}\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_3(z)|^4\,dz = \frac{g_{3d}}{\sqrt{2\pi}(a_{\text{ho}}^z)} = \frac{4\pi a_s\hbar^2}{m}\frac{1}{\sqrt{2\pi}(a_{\text{ho}}^z)} = 2\sqrt{2\pi}a_s(a_{\text{ho}}^z)(\hbar\omega_z). \tag{2.2.21}$$

2.3. Adimensionnement

Dans la littérature, différents adimensionnements sont utilisés (Fetter et al., 2005; Tsubota et al., 2002; Aftalion and Rivière, 2001). Pour permettre de passer facilement d'un adimensionnement à un autre, nous introduisons un paramètre ε et définissons une longueur caractéristique générale :

$$x_s = \frac{a_{\text{ho}}}{\sqrt{\varepsilon}}, \quad a_{\text{ho}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_\perp}}, \tag{2.3.1}$$

où a_{ho} est la longueur de l'oscillateur harmonique par rapport à la fréquence de piégeage de référence $\omega_\perp$. Pour adimensionner le temps on définit $t_s = \frac{1}{\omega_\perp}$. En introduisant $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x}/x_s$, $\tilde{t} = t/t_s$ et

$$u = \frac{\psi}{\sqrt{N}\,x_s^{-d/2}} = \varepsilon^{-d/4}\frac{\psi}{\sqrt{N}\,a_{\text{ho}}^{-d/2}}, \text{ où } d = 2 \text{ ou } 3 \text{ est la dimension d'espace,} \tag{2.3.2}$$

l'équation de propagation en temps réel devient :

$$iC_t \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta u + C_{\text{trap}} u + C_g |u|^2 u - iC_\Omega (\mathbf{A}^t \nabla) u, \tag{2.3.3}$$

où

$$C_{\text{trap}}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \frac{1}{\varepsilon^2} \tilde{V}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}), \quad \tilde{V}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \frac{1}{m\omega_\perp^2 x_s^2} V_{\text{trap}}(x, y, z) \tag{2.3.4}$$

$$\boxed{C_g = \sqrt{\varepsilon}\, \beta}, \quad \beta = \frac{4\pi N a_s}{a_{\text{ho}}} \quad \text{(en 3D)}, \quad \beta = \beta_{2D} \quad \text{(donné en 2D)}, \tag{2.3.5}$$

$$C_t = \frac{1}{\varepsilon}, \quad C_\Omega = \frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\Omega}{\omega_\perp}\right). \tag{2.3.6}$$

L'énergie de Gross-Pitaevskii adimensionnée s'écrit alors :

$$E(u) = \frac{\mathcal{E}(\psi)}{N\hbar\omega_\perp} = \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2}|\nabla u|^2 + C_{\text{trap}}\, |u|^2 + \frac{1}{2} C_g |u|^4 - iC_\Omega\, u^* \mathbf{A}^t \nabla u\right] d\tilde{\mathbf{x}}, \tag{2.3.7}$$

La conservation de la masse (2.1.5) devient :

$$\|u\|_2^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |u(\tilde{\mathbf{x}})|^2 \, d\tilde{\mathbf{x}} = 1. \tag{2.3.8}$$

Le moment angulaire total (2.1) par particule est exprimé en unités $\hbar$:

$$\tilde{L}_z = \frac{L_z}{N\hbar} = i \int_{\mathbb{R}^d} u^* \mathbf{A}^t \nabla u d\tilde{\mathbf{x}} = \int_{\mathbb{R}^d} Real\left(iu^* \mathbf{A}^t \nabla u\right) d\tilde{\mathbf{x}}. \tag{2.3.9}$$

L'énergie (2.1.6) prend la forme :

$$E(u) = \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2}\left|\nabla u + iC_\Omega\, A^t u\right|^2 + C_{\text{trap}}^{\text{eff}}\, |u|^2 + \frac{1}{2} C_g |u|^4\right] d\tilde{\mathbf{x}}, \tag{2.3.10}$$

et le grand potentiel (2.1.8) devient :

$$\tilde{\Xi} = E(u) - \tilde{\mu} \int_{\mathbb{R}^d} |u|^2 \, d\tilde{\mathbf{x}}, \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp}. \tag{2.3.11}$$

La forme adimensionnée du potentiel effectif (2.1.7) est définie comme :

$$C_{\text{trap}}^{\text{eff}} = C_{\text{trap}} - \frac{1}{2} C_\Omega^2\, \tilde{r}^2 = \frac{1}{\varepsilon^2}\left(\tilde{V}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) - \frac{1}{2}\left(\frac{\Omega}{\omega_\perp}\right)^2 \tilde{r}^2\right) = \frac{1}{\varepsilon^2}\, \tilde{V}^{\text{eff}}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}). \tag{2.3.12}$$

Finalement, la forme adimensionnée de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire (2.1.9) devient :

$$-\frac{1}{2}\Delta u + C_{\text{trap}} u + C_g |u|^2 u - iC_\Omega \mathbf{A}^t \nabla u = \frac{1}{\varepsilon}\tilde{\mu}\, u. \tag{2.3.13}$$

En ce qui concerne le potentiel de piégeage, nous considérons dans la suite une forme générale *quadratique+quartique* qui permet de retrouver les expressions utilisées dans la plupart des études théoriques et expérimentales du condensat en rotation. On introduit donc le potentiel suivant (potentiel harmonique + faisceau laser résonant, voir (Bretin et al., 2004)) :

$$V_{\text{trap}}(x, y, z) = \frac{m}{2}\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right) + U_2 \left(\frac{r}{w_2}\right)^2 + U_4 \left(\frac{r}{w_4}\right)^4. \tag{2.3.14}$$

On obtient à partir de (2.3.4) et (2.3.12) le potentiel effectif adimensionné :

$$\tilde{V}^{\text{eff}}(\tilde{x},\tilde{y},\tilde{z}) = \frac{1}{2}\left(a_x\tilde{x}^2 + a_y\tilde{y}^2 + a_z\tilde{z}^2 + a_4\tilde{r}^4\right). \tag{2.3.15}$$

Les coefficients adimensionnés sont :

$$\begin{cases} a_x = \left(\dfrac{\omega_x}{\omega_\perp}\right)^2 - \left(\dfrac{\Omega}{\omega_\perp}\right)^2 + 2\left(\dfrac{U_2}{m\omega_\perp^2 w_2^2}\right), \\ a_y = \left(\dfrac{\omega_y}{\omega_\perp}\right)^2 - \left(\dfrac{\Omega}{\omega_\perp}\right)^2 + 2\left(\dfrac{U_2}{m\omega_\perp^2 w_2^2}\right), \\ a_z = \left(\dfrac{\omega_z}{\omega_\perp}\right)^2, \\ a_4 = \dfrac{2}{\varepsilon}\left(\dfrac{U_4\, a_{\text{ho}}^2}{m\omega_\perp^2 w_4^4}\right) \end{cases} \tag{2.3.16}$$

L'adimensionnement classique utilisé dans la littérature physique est retrouvé pour $\varepsilon = 1$. Dans certaines études mathématiques (Aftalion and Rivière, 2001; Aftalion, 2006) ε est défini comme :

$$\varepsilon = \left(\frac{a_{\text{ho}}}{8\pi N a_s}\right)^{2/5}. \tag{2.3.17}$$

Ce deuxième adimensionnement, dénommé AR (Aftalion and Rivière, 2001), est particulièrement approprié dans le régime de Thomas-Fermi (TF). Ce régime est atteint quand l'énergie cinétique est faible devant l'énergie d'interaction : $Na_s/a_{\text{ho}} \gg 1$, ce qui est souvent le cas dans les expériences ((Madison et al., 2000b, 2001; Rosenbusch et al., 2002; Bretin et al., 2004)). Dans ce cas, ε est un petit paramètre ($\varepsilon \approx 10^{-2}$ dans les expériences). On note alors en utilisant (2.3.5) que $C_g = \frac{1}{2\varepsilon^2}$ et l'énergie de GP 2.3.10 devient :

$$E(u) = \int_{\mathbb{R}^d}\left[\frac{\varepsilon}{2}\left|\nabla u + iC_\Omega\, A^t u\right|^2 + \frac{1}{\varepsilon}\tilde{V}^{\text{eff}}\,|u|^2 + \frac{1}{4\varepsilon}|u|^4\right] d\tilde{\mathbf{x}}, \tag{2.3.18}$$

qui est en effet dominée par le terme d'interaction et de piégeage. La mise à l'échelle d'Aftalion-Rivière a été utilisée avec succès dans des simulations numériques pour des configurations en 2D (Aftalion and Du, 2001) ou 3D (Aftalion and Danaila, 2003, 2004; Danaila, 2005) de condensats avec des vortex.

3. Calcul d'états stationnaires de l'équation de Gross-Pitaevskii

Ce chapitre a fait l'objet d'une publication : Guillaume Vergez, Ionut Danaila, Sylvain Auliac, Frédéric Hecht, A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation, Computer Physics Communications, 2016.

L'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire peut être utilisée soit pour générer des états initiaux dans la simulation de la dynamique en temps réel de condensats de Bose-Einstein, soit pour étudier directement des configurations physiques observés expérimentalement. Dans le premier cas on recherche plutôt l'état fondamental alors que dans le second cas, il peut être intéressant d'obtenir des minima locaux (états méta-stables). L'étude des vortex quantifiés dans le condensat est un bon exemple de l'utilité des simulations numériques dans l'étude de configurations physiques. La superfluidité est liée à la formation de vortex. Leur simulation a attiré l'attention de nombreux physiciens et mathématiciens souhaitant comprendre cet état.

De nombreuses études expérimentales et théoriques ont été consacrées aux propriétés en trois dimensions des lignes de vortex, des anneaux de vortex ou des réseaux d'Abrikosov : Barenghi et al. (2001); Kevrekidis et al. (2008); Barenghi and Sergeev (2008); Halperin and Tsubota (2009). Les simulations numériques d'états stationnaires en trois dimensions se sont révélées être utiles pour étudier ces sujets, aidant à la compréhension de propriétés des vortex difficiles à observer expérimentalement, suggérant de nouvelles configurations ou appuyant de nouvelles théories physiques ou mathématiques (Kasamatsu et al., 2005; Berloff, 2004; Aftalion and Danaila, 2003, 2004; Danaila, 2005; Kasamatsu and Tsubota, 2008).

La difficulté dans la construction de solutions de l'équation de Gross-Pitaevskii avec rotation vient de la présence d'un grand nombre de vortex. Ceci explique l'utilisation dans la littérature de méthodes de discrétisation spatiale d'ordre élevé : méthode spectrale de type Fourier (García-Ripoll and Pérez-García, 2001b,a; Zeng and Zhang, 2009), différences finies d'ordre six (Aftalion and Danaila, 2003, 2004; Danaila, 2005), méthode spectrale sinusoïdale (Bao and Du, 2004; Bao et al., 2006a), méthode pseudo-spectrale de Laguerre-Hermite (Bao and Shen, 2008), méthode de discrétisation hybride de Galerkin discontinue basée sur des polynômes et des ondes planes (Farhat and Toivanen, 2012), etc.

De nombreux logiciels pour la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire ont été déposés dans la bibliothèque de programmes de Computer Physics Communications (CPC). Ils utilisent différentes méthodes : méthode de diagonalisation itérative (Tiwari and Shukla, 2006), algorithme d'amortissement optimal (Dion and Cancès, 2007; Hohenester, 2014), schéma de Crank-Nicolson (Muruganandam and Adhikari, 2009), méthode de type Newton avec une recherche linéaire (Caliari and Rainer, 2013; Vudragović et al., 2012), schéma de Runge-Kutta d'ordre quatre (Caplan, 2013), schéma d'Euler semi-implicite (Antoine and Duboscq, 2014), etc. La discrétisation spatiale est souvent spectrale (Dion and Cancès, 2007; Caliari and Rainer, 2013; Antoine and Duboscq, 2014) ou basée sur des différences finies (Muruganandam and Adhikari, 2009; Vudragović et al., 2012; Caplan, 2013; Hohenester, 2014). Les programmes fournies sont écrits en Fortran (Dion and Cancès, 2007; Muruganandam and Adhikari, 2009), C (Vudragović et al., 2012; Caplan, 2013) ou Matlab (Caliari and Rainer, 2013; Caplan, 2013;

Antoine and Duboscq, 2014; Hohenester, 2014).

Les méthodes numériques basées sur une discrétisation de type éléments finis de Lagrange sont moins représentées dans ce domaine. Des états avec vortex ont été simulés en utilisant des éléments finis avec un maillage fixe dans Aftalion and Du (2001); Bao and Tang (2003); Bao and Du (2004); Baksmaty et al. (2009) ou des maillages adaptés dynamiquement dans Danaila and Hecht (2010), mais seulement pour des configurations 2D. Nous avons réalisé un code permettant de résoudre l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire avec rotation basé sur une discrétisation en éléments finis avec adaptation de maillage. Ce code a été construit comme une toolbox pour le logiciel FreeFem++ (Hecht, 2012; Hecht et al., 2007) nommée GPFEM. Elle contient deux méthodes numériques construisant des états stationnaires avec vortex et présentant les améliorations suivantes :

(i) l'algorithme de descente basé sur la méthode de gradient de Sobolev présenté dans (Danaila and Kazemi, 2010) et testé pour des configuration 2D dans (Danaila and Hecht, 2010) a été amélioré en ajoutant une recherche linéaire optimale du pas de descente et en explorant des configurations 3D ;

(ii) une nouvelle méthode de minimisation pour des configurations 2D et 3D a été implémentée en se basant sur la librairie d'optimisation Ipopt (Wächter, 2002) qui utilise une méthode d'optimisation de point intérieur ;

(iii) l'adaptation de maillage présentée dans Danaila and Hecht (2010) pour des configurations 2D a été étendue à la 3D en utilisant des fonctions d'adaptation de maillage anisotropes fournies par les logiciels **mshmet** (C. Dapogny and Frey, 2014) et **mmg3d** (Dobrzynski and Frey, 2012).

Du point de vue de la programmation, la toolbox fournit les avantages suivants :

(iv) la possibilité de passer facilement d'éléments finis linéaires P_1 à des éléments finis quadratiques P_2 ou d'ordre plus élevé (P_3 ou P_4) en modifiant une unique instruction ;

(v) les programmes sont faciles à adapter pour différentes configurations mathématiques ou physiques (deux adimensionnements sont implémentés) ;

(vi) une interface graphique permet de lancer des exemples prédéfinis en 2D ou en 3D.

Dans ce chapitre, on présente en premier lieu dans la section 3.1 plusieurs manières de construire des initialisations qui serviront de point de départ dans les algorithmes itératifs. Ces dernières peuvent servir d'initialisations dans les algorithmes de recherche de l'état fondamental ou être directement utilisées comme solution à $t = 0$ dans un schéma d'évolution en temps. On expose ensuite des méthodes pour trouver des minima $u(\mathbf{x})$ de l'énergie de GP adimensionnée (2.3.7) ou (2.3.10), sous la contrainte (2.3.8).

Le problème est posé sur un domaine $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^d$ où $d \in \{1, 2, 3\}$ est la dimension d'espace, avec des conditions sur le bord $\partial\mathcal{D}$ de Dirichlet homogène $u = 0$. Les dimensions de $\mathcal{D}$ sont estimées à partir de l'approximation de Thomas-Fermi. Une méthode de type gradient de Sobolev pour la minimisation de l'énergie est exposée dans la section 3.2. Nous présentons ensuite dans la section 3.3 la bibliothèque Ipopt (J. Nocedal and Waltz, 2008; Wächter, 2002; Wächter and Biegler, 2006) qui permet une résolution de l'équation avec une méthode d'optimisation de type point intérieur et une recherche linéaire optimisée. Ces méthodes ont été implémentées avec le logiciel FreeFem++ (Hecht et al., 2007). On présente dans la section 3.4.2 des exemples en 2 dimensions et en 3 dimensions. Pour finir, on décrit dans la section 3.4 le fonctionnement et l'utilisation de la toolbox munie d'une interface.

3.1. Construction de l'état initial pour la minimisation de l'énergie de Gross-Pitaevskii

Lorsqu'on veut trouver numériquement des états stationnaires pour le condensat en rotation, il est primordial de bien construire la fonction d'onde qui servira de point de départ dans les algorithmes itératifs. Non seulement cela affecte la vitesse de convergence des algorithmes mais aussi la topologie de la solution stationnaire, surtout lorsque des minima locaux (états méta-stables) sont recherchés. Plusieurs approximations sont possibles (Bao and Tang, 2003) et nous en présentons ici quatre. Tout d'abord nous utilisons l'approximation de Thomas-Fermi dans le cas d'interactions fortes. Une solution analytique existe dans ce cas et donne une idée de la taille du condensat et donc du domaine de calcul. Ensuite, dans le cas où le potentiel de piégeage est isotrope, on peut réduire d'une dimension le problème en considérant que la solution est axisymétrique. On peut aussi considérer l'équation stationnaire sans rotation comme approximation. Enfin, on donne un moyen de construire des approximations (ansatz) d'états initiaux avec des vortex.

3.1.1. Approximation de Thomas-Fermi

Le régime de Thomas-Fermi est caractérisé par des interactions fortes. La longueur de cicatrisation $\xi = (8\pi a_s \rho)^{-1/2}$, avec ρ la densité atomique, est définie comme la longueur pour laquelle les énergies cinétique et d'interaction sont comparables. Dans le régime de Thomas-Fermi les longueurs caractéristiques du système sont très grandes par rapport à ξ. Des valeurs typiques de ces longueurs dans des expériences de condensats en rotation (Madison et al., 2000b,a; Bretin et al., 2003) sont :

$$\begin{array}{ccccccccc} a_s & \ll & 1/\rho^{1/3} & < & \xi & \ll & a_{\text{ho}} & \ll & R \\ 5\,[nm] & \ll & 0.2\,[\mu m] & < & 0.3\,[\mu m] & \ll & 1\,[\mu m] & \ll & 5\,[\mu m], \end{array}$$

où $1/\rho^{1/3}$ approche la distance entre atomes et R est le rayon du condensat.
On considère donc que l'énergie cinétique est faible devant les forces d'interaction. Ceci revient à simplifier le terme $\int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{2} \left|\nabla u + iC_\Omega\, A^t u\right|^2$ dans (2.3.10) et on obtient ainsi l'énergie de Thomas-Fermi :

$$E_{\text{TF}}(u) = \int_{\mathbb{R}^d} C_{\text{trap}}^{\text{eff}}\, |u|^2 + \frac{1}{2} C_g |u|^4.$$

En résolvant l'équation liée à la minimisation de cette énergie, on trouve la densité atomique :

$$\rho_{\text{TF}} = |u|^2 = \left(\frac{\tilde{\mu}/\varepsilon - C_{\text{trap}}^{\text{eff}}}{C_g} \right)_+ = \frac{1}{\varepsilon^2 C_g} \left(\varepsilon \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} - \tilde{V}^{\text{eff}} \right)_+ . \tag{3.1.1}$$

Notons que cette forme est équivalente à la forme usuelle de l'approximation de Thomas-Fermi pour des cas sans rotation mais avec un potentiel de piégeage (2.3.12) corrigé par le terme centrifuge (Stringari, 1999). Le potentiel chimique μ est déterminé en imposant la contrainte de norme unitaire :

$$\int_{\mathcal{D}} |u|^2 = 1 \Rightarrow \int_{\mathcal{D}} (\varepsilon \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} - \tilde{V}^{\text{eff}}) = \varepsilon^2 C_g. \tag{3.1.2}$$

Le bord $\delta\mathcal{D}$ du condensat peut ensuite être défini comme l'ensemble des points tels que

$$\varepsilon \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp} - \tilde{V}^{\text{eff}} = 0.$$

Ceci nous permet d'obtenir une estimation du domaine $\mathcal{D}$ occupé par le condensat. Les calculs analytiques pour déterminer μ ainsi que la forme et la taille du domaine $\mathcal{D}$ dans le cas de l'approximation de Thomas-Fermi pour différents cas de potentiels (quadratique $\pm$ quartique) sont donnés dans l'annexe (A).

3.1.2. Solution dans le cas sans rotation et solution axisymétrique

L'approximaion de Thomas-Fermi présente un inconvénient. Comme il s'agit d'une parabole tronquée, sa dérivée est discontinue sur le bord du condensat où $\rho_{\text{TF}} = 0$. Cela peut déclencher des oscillations de la solution quand des méthodes d'ordre élevé (spectrales par exemple) sont utilisées pour la discrétisation en espace. Il est possible d'obtenir des approximations plus régulières en résolvant l'équation de Gross-Pitaevskii dans des cas simplifiés. Lorsqu'on considère le cas d'une énergie axisymétrique, ou d'une énergie sans rotation, on peut résoudre le problème rapidement et à faible coût en utilisant la bibliothèque Ipopt (Wächter, 2002; Wächter and Biegler, 2006; J. Nocedal and Waltz, 2008), que nous décrirons dans un cas plus général dans la section (3.3).

On présente tout d'abord le cas axisymétrique d'un condensat sans vortex quand le potentiel de piégeage est isotrope $a_x = a_y$. On consière les coordonnées cylindriques (r, θ, z) et on suppose que la solution est axisymétrique ($\frac{\partial u}{\partial \theta} = 0$) et symétrique par rapport au plan $z = 0$, $(u(z) = u(-z))$. Ceci est le cas de l'approximation de Thomas-Fermi.

Puisque $\frac{\partial u}{\partial \theta} = x\frac{\partial u}{\partial y} - y\frac{\partial u}{\partial x}$ on déduit que $L_z = 0$. L'énergie devient alors :

$$\begin{aligned}
E(u) &= \int_{\mathcal{D}} \left[\frac{1}{2}\left(\left|\frac{\partial u}{\partial r}\right|^2 + \left|\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial \theta}\right|^2 + \left|\frac{\partial u}{\partial z}\right|^2\right) + C_{\text{trap}}^{\text{eff}}|u|^2 + \frac{1}{2}C_g|u|^4\right] r dr\, d\theta\, dz \\
&= 2\pi \int_0^{R_{max}} \int_{-z_{max}}^{z_{max}} \left[\frac{1}{2}\left(\left|\frac{\partial u}{\partial r}\right|^2 + \left|\frac{\partial u}{\partial z}\right|^2\right) + C_{\text{trap}}^{\text{eff}}|u|^2 + \frac{1}{2}C_g|u|^4\right] r dr\, dz \\
&= 4\pi \int_0^{R_{max}} \int_0^{z_{max}} \left[\frac{1}{2}\left(\left|\frac{\partial u}{\partial r}\right|^2 + \left|\frac{\partial u}{\partial z}\right|^2\right) + C_{\text{trap}}^{\text{eff}}|u|^2 + \frac{1}{2}C_g|u|^4\right] r dr\, dz.
\end{aligned}$$

En posant $a_r = a_x = a_y$, le potentiel de piégeage (2.3.15) peut s'exprimer comme :

$$\tilde{V}^{\text{eff}}(\tilde{r}, \tilde{z}) = \frac{1}{2}\left(a_r\tilde{r}^2 + a_z\tilde{z}^2 + a_4\tilde{r}^4\right). \tag{3.1.3}$$

$C_{\text{trap}}^{\text{eff}}$ ne dépend donc que de la variable radiale r et de z. Le problème 3D est ainsi réduit à un problème en 2 dimensions. Pour résoudre ce problème avec Ipopt on a besoin de la dérivée au sens de Fréchet de l'énergie et de sa Hessienne (* désigne la conjugaison complexe) :

$$E'(u).v = 4\pi \int_0^{R_{max}} \int_0^{z_{max}} \Re\left[\frac{\partial u^*}{\partial r}\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u^*}{\partial z}\frac{\partial v}{\partial z} + 2C_{\text{trap}}^{\text{eff}}u^*v + 2C_g|u|^2u^*v\right] r dr\, dz,$$

$$E''(u)[v, w] = 4\pi \int_0^{R_{max}} \int_0^{z_{max}} \Re\left[\frac{\partial v^*}{\partial r}\frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial v^*}{\partial z}\frac{\partial w}{\partial z} + 2C_{\text{trap}}^{\text{eff}}v^*w + 2C_g\left(v^*w|u|^2 + 2u^*v\Re(u^*w)\right)\right] r dr dz.$$

Dans le cas d'une simulation 2D, l'axisymétrie réduit le problème 2D à un problème 1D. L'intégration et la dérivation par rapport à z dans la formulation précédente doivent alors être omises. Comme FreeFem++ ne résout que des problèmes en 2D ou en 3D, on a recourt à une astuce consistant à effectuer la résolution sur un maillage rectangulaire très allongé et ne contenant qu'un point sur la largeur, comme sur la figure 3.1. En imposant ensuite une périodicité dans la direction y, on perd la dépendance en cette variable d'espace.

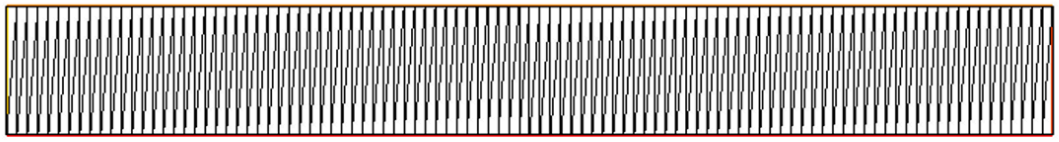


FIGURE 3.1.: Maillage pour résoudre un problème 1D. Il contient 1 point sur la largeur et 50 sur la longueur. Une condition de périodicité est imposée dans la direction y.

Notons que cette réduction de dimension n'est pas possible dans le cas d'un potentiel anisotrope où $a_x \neq a_y$. Le potentiel de piégeage donne alors au condensat une forme étirée autour de l'axe des x si $a_x < a_y$ et de l'axe des y si $a_x > a_y$. Dans ce cas, la solution n'est pas axisymétrique et $\frac{\partial u}{\partial \theta} \neq 0$. On peut tout de même prendre comme approximation la solution du problème sans rotation ($L_z = 0$). Encore une fois, en utilisant Ipopt, la suppression du terme de rotation permet une résolution peu coûteuse.

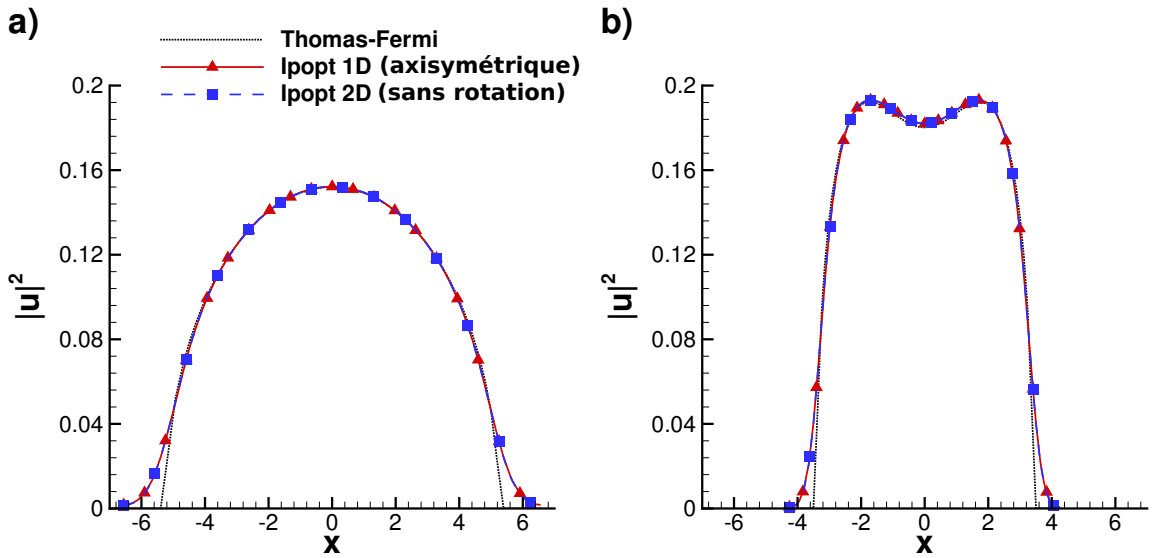


FIGURE 3.2.: Initialisation d'un calcul 2D. Profils de densité correspondant à l'approximation de Thomas-Fermi (ligne continue), la solution axisymétrique construite avec Ipopt (▲) et la solution 2D sans rotation construite avec Ipopt (■). Potentiel harmonique isotrope (a) et potentiel quartique+quadratique isotrope (b).

Dans le cas 2D, la figure 3.2 présente une comparaison entre l'approximation de Thomas-Fermi, la solution axisymétrique et la solution sans rotation obtenues avec Ipopt pour deux potentiels de piégeage isotropes (2.3.15) : potentiel harmonique, avec $a_x = a_y = 1, a_4 = 0$ et quartique+quadratique, avec $a_x = a_y = 1, a_4 = 0.5$. Remarquons la régularité de la solution axisymétrique au voisinage de $\rho_{\text{TF}} = 0$ et la bonne approximation qu'elle offre, comparée à l'entière construction de la solution 2D. Dans le tableau 3.1.2, nous comparons la valeur de l'énergie de Gross-Pitaevskii obtenue par ces approximations. On remarque que les approximations construites avec Ipopt ont une énergie de Gross-Pitaevskii inférieure à celle de l'approximation

de Thomas-Fermi pour les deux cas de potentiel de piégeage. Ces approximations sont donc meilleures.

Initialisation \ Potentiel	Harmonique	Quartique
Thomas-Fermi	E = 8.58168	E = 18.129
Ipopt axisymétrique 1D	E = 8.53115	E = 17.9123
Ipopt sans rotation 2D	E = 8.54455	E = 17.9575

TABLE 3.1.: Comparaison de l'énergie de Gross-Pitaevskii de l'approximation de Thomas-Fermi, la solution axisymétrique construite avec Ipopt et la solution en 2D sans rotation construite avec Ipopt. Potentiel harmonique isotrope et potentiel quartique+quadratique isotrope.

3.1.3. Construction de vortex dans le champ initial

Afin de construire des minimum locaux (ou états méta-stables) de l'énergie de Gross-Pitaevskii il est utile de rajouter des vortex dans les initialisations. Si $u(x, y, z)$ est l'état fondamental sans rotation construit avec l'approximation de Thomas Fermi ou Ipopt, on peut rajouter des vortex en multipliant u dans chaque plan $z = const$ par l'ansatz suivant utilisé dans Aftalion and Danaila (2004); Danaila (2005) pour des simulations 3D :

$$u_v(x, y) = \sqrt{\frac{1}{2}\left[1 + tanh\left(\frac{4}{\varepsilon_v}(r_v - \varepsilon_v)\right)\right]} \cdot e^{i\theta_v}, \tag{3.1.4}$$

où $r_v = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}$ et $\theta_v = atan\left(\frac{y-y_c}{x-x_c}\right)$ sont les coordonnées polaires par rapport au centre du vortex (x_c, y_c) et ε_v est le rayon du vortex. Pour obtenir une forme particulière du vortex en 3D (forme de U ou forme de S), on peut faire varier le centre du vortex dans chaque plan $z = const$. Par exemple, un vortex avec une forme de S dans le plan $y = 0$ aura le centre de coordonnées $y_c = 0$ et

$$\begin{cases} x_c(z) = -1 + \dfrac{\tanh\left[\alpha_v\left(1 + \frac{z}{\beta_v}\right)\right]}{\tanh(\alpha_v)}, & \text{si } z < 0, \\ x_c(z) = 1 + \dfrac{\tanh\left[\alpha_v\left(-1 + \frac{z}{\beta_v}\right)\right]}{\tanh(\alpha_v)}, & \text{si } z \geq 0, \end{cases} \tag{3.1.5}$$

où α_v et β_v contrôlent la courbure et la longueur du vortex. Sur la figure 3.1.3 nous présentons deux isocontours de la densité $\rho = |\psi|^2$ de l'approximation de Thomas-Fermi dans lesquels ont été rajoutés un modèle de vortex ayant une forme de U et une forme de S en utilisant la formule précédente.

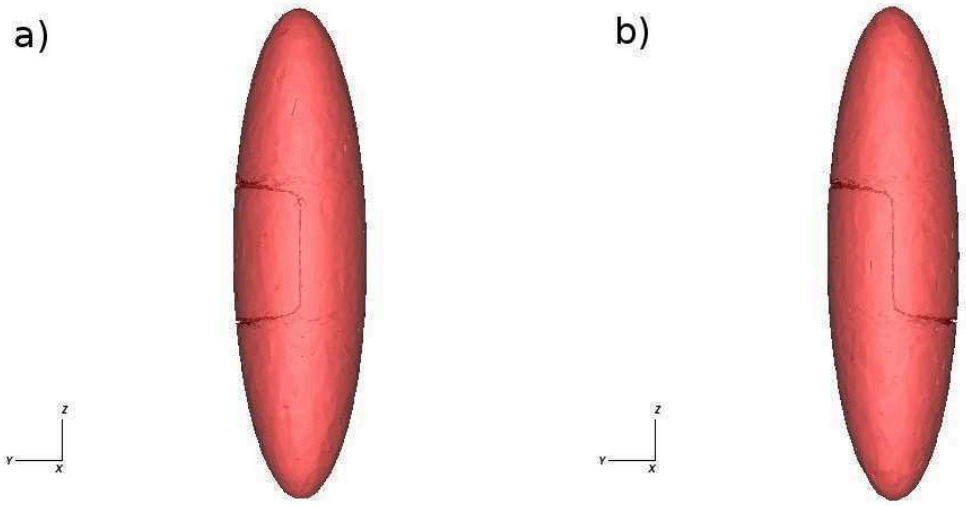


FIGURE 3.3.: Isocontours de la densité $\rho = |\psi|^2$ d'une initialisation de Thomas-Fermi dans laquelle a été rajouté un modèle de vortex ayant une forme de U (a) et une forme de S (b).

Solution axisymétrique avec un vortex central

Afin de réduire d'une dimension le problème de minimisation, on souhaite s'inspirer de l'approximation axisymétrique mais en générant cette fois un vortex central dans le cas d'un potentiel de piégeage isotrope ($a_x = a_y$). Considérons la forme générale de la fonction d'onde en coordonnées cylindriques $u(r, z, \theta) = \sqrt{\rho(r, z)}e^{iS(r,\theta,z)}$ où ρ est la densité et S la phase. Soit m un entier naturel, en prenant la phase sous la forme $S(r, \theta, z) = m\theta$ on génère une unique discontinuité en $\theta = 2k\pi$ et donc un unique vortex. Supposons de plus que $U(r, z) = \sqrt{\rho(r, z)}$ est axisymétrique (*i. e.* ne dépend pas de θ). Alors on obtient une approximation axisymétrique avec un vortex central de charge m ($m = 1$ pour un vortex simple). En posant

$$C_{\mathrm{m}}^{\mathrm{eff}} = C_{\mathrm{trap}}^{\mathrm{eff}} + \left(\frac{m}{2r}\right)^2 - C_\Omega m,$$

l'énergie de Gross-Pitaevskii se réécrit dans ce cas :

$$E(U) = 4\pi \int_0^{R_{max}} \int_0^{z_{max}} \left[\frac{1}{2}\left(\left|\frac{\partial U}{\partial r}\right|^2 + \left|\frac{\partial U}{\partial z}\right|^2\right) + C_{\mathrm{m}}^{\mathrm{eff}}|U|^2 + \frac{1}{2}C_g|U|^4\right] r dr\, dz.$$

On a de nouveau réduit d'une dimension le problème de minimisation. On utilise encore une fois Ipopt pour résoudre ce cas. Dans le cas 2D d'une minimisation avec un potentiel de piégeage isotrope quadratique (2.3.16) avec $a_x = a_y = 1$, on a ainsi construit des conditions initiales contenant un vortex central pour $m = 1$ et $m = 2$.

On présente dans le tableau 3.1.3 les niveaux d'énergie obtenus pour l'approximation de Thomas-Fermi avec un modèle de vortex ($m = 1$), et la solution axisymétrique avec vortex central obtenue avec Ipopt pour $m = 1$ et $m = 2$. Le niveau d'énergie obtenu avec l'approximation axisymétrique avec vortex central est plus bas que celui de l'approximation de Thomas-Fermi : on a ainsi généré une meilleure initialisation dans ce cas.

Dans la figure 3.1.3, on trace ces deux approximations. La solution obtenue avec Iopopt est encore une fois plus régulière sur le bord du condensat, mais on constate aussi que le vortex central est plus profond et plus large.

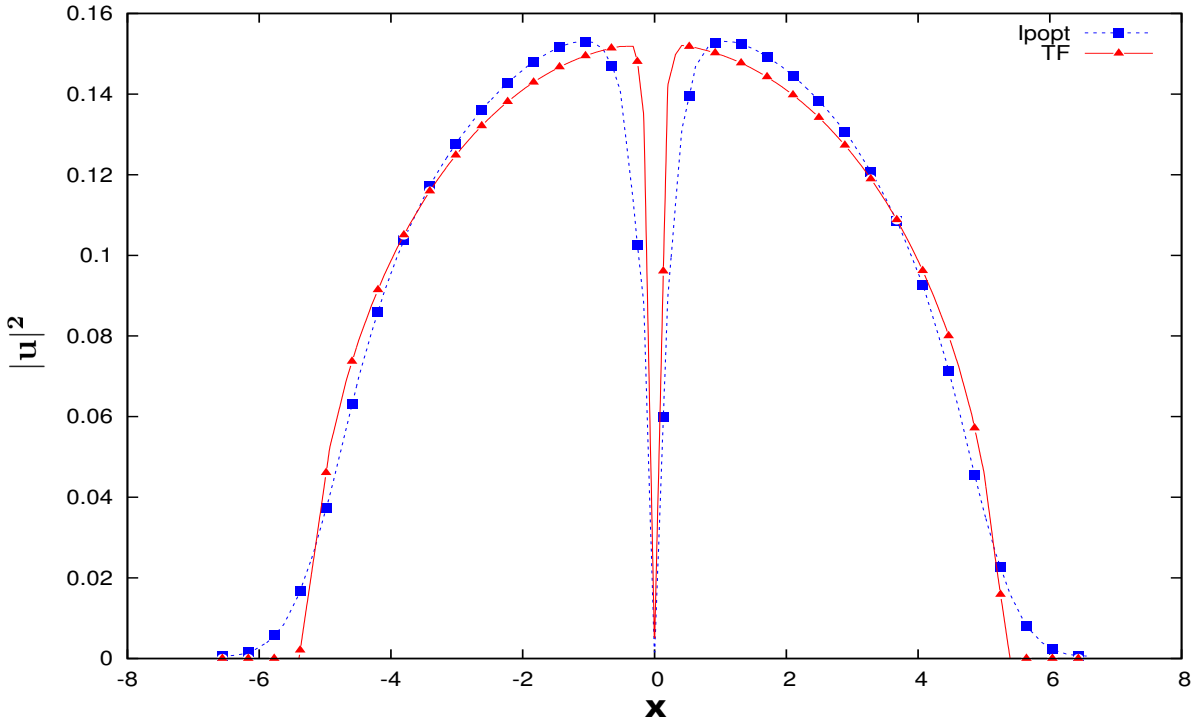


FIGURE 3.4.: Condensat avec un vortex central de charge $m = 1$. Comparaison de l'approximation de Thomas-Fermi avec un modèle de vortex (▲) et d'une solution axisymétrique obtenue avec Ipopt (■).

	Thomas-Fermi ($m = 1$)	Ipopt $m = 1$	Ipopt $m = 2$
Energie	8.47195	8.31533	8.32811

TABLE 3.2.: Approximations d'un condensat avec un vortex central de charge $m = 1$ ou $m = 2$. Énergie de l'approximation de Thomas-Fermi avec un modèle de vortex, et de la solution axisymétrique avec vortex central obtenue avec Ipopt.

3.2. Minimisation de l'énergie avec une méthode de gradient de Sobolev

3.2.1. Formulation de la méthode

La première méthode implémentée dans notre toolbox et que nous décrivons ici est la méthode de descente utilisant les gradients de Sobolev présentée dans Danaila and Kazemi (2010); Danaila and Hecht (2010). La plupart des algorithmes que l'on trouve dans la littérature utilisent la méthode de propagation en temps imaginaire pour minimiser l'énergie. Les méthodes itératives sont alors appliquées à l'équation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2}\frac{\partial E(u)}{\partial t} = \frac{1}{2}\Delta u - C_{\text{trap}} u - C_g |u|^2 u + i C_\Omega \mathbf{A}^t \nabla u, \tag{3.2.1}$$

pour avancer du temps discret t_n à t_{n+1}. La solution obtenue à chaque pas de temps est ensuite normalisée pour respecter la contrainte de norme unité. L'équation (3.2.1) peut être résolue par des schémas d'intégration en temps usuels tels que celui de Runge-Kutta-Fehlberg (García-Ripoll and Pérez-García, 2001a), de splitting de Strang (Aftalion and Du, 2001; Bao

and Du, 2004), de Crank-Nicolson (Muruganandam and Adhikari, 2009), de Crank-Nicolson combiné à celui de Runge-Kutta (Aftalion and Danaila, 2003, 2004; Danaila, 2005). Il est intéressant d'observer que le terme de droite dans l'équation (3.2.1) correspond au gradient L^2 de la fonctionnelle d'énergie. Une amélioration significative de la convergence est obtenue en remplaçant ce gradient par un gradient défini dans l'espace de Sobolev H^1. La méthode de gradient de Sobolev est un algorithme de minimisation utilisant une méthode de descente suivant la direction du gradient :

$$\begin{cases} u_{n+1} = u_n - \alpha_n \, \mathcal{G}_n, \\ u_0 = u_0(\mathbf{x}). \end{cases} \tag{3.2.2}$$

$\mathcal{G}_n$ représente le gradient de la fonctionnelle d'énergie à l'itération n et α_n le pas de descente. Il existe plusieurs manières de définir ce gradient, selon l'espace de Hilbert dans lequel on travaille et le produit scalaire que l'on considère. L'idée introduite dans Danaila and Kazemi (2010) est de définir un gradient dépendant de la forme de l'énergie (2.3.10). Un nouvel espace de Hibert dénoté $H_A(\mathcal{D}, \mathbb{C})$, a été défini et muni du produit scalaire :

$$\langle u, v \rangle_{H_A} = \int_{\mathcal{D}} \langle u, v \rangle + \langle \nabla_A u, \nabla_A v \rangle, \quad \nabla_A = \nabla + iC_\Omega A, \tag{3.2.3}$$

où $\langle u, v \rangle = uv^*$ est le produit scalaire complexe. Dans Danaila and Kazemi (2010), il a été prouvé que la norme issue de ce produit scalaire $\| \cdot \|_{H_A}$ est équivalente à la norme standard $\| \cdot \|_{H^1}$. Donc le complété de $C^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$ par rapport à cette norme correspond à H^1 tout entier. De plus, la dérivée de l'énergie $E'(u)$ est une forme linéaire continue sur H^1. Il s'ensuit que l'on peut appliquer le théorème de représentation de Riez dans l'espace de Hilbert $H_A = H^1$. On définit ainsi le gradient de Sobolev $\nabla_{H_A} E(u)$ comme l'unique membre de H^1 tel que, $\forall v \in H^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$:

$$E'(u)v = \Re\langle \Delta E(u), v \rangle_{L^2} = \Re\langle \nabla_{H^1} E(u), v \rangle_{H^1} = \Re\langle \nabla_{H_A} E(u), v \rangle_{H_A}. \tag{3.2.4}$$

Le gradient L^2 de l'énergie peut facilement être dérivé de (2.3.7) :

$$\nabla_{L^2} E(u) = 2\varepsilon \left(-\frac{1}{2}\Delta u + C_{\text{trap}} u + C_g |u|^2 u - iC_\Omega \mathbf{A}^t \, \nabla u \right), \tag{3.2.5}$$

et la relation (3.2.4) permet alors de calculer le gradient H_A.
Dans la littérature, pour imposer la contrainte de norme unitaire (2.3.8), il est fréquent de diviser la solution par sa norme L^2 à chaque itération la solution. Pour éviter cela, on préfère ici utiliser un gradient projeté sur l'espace tangent à la contrainte.
Pour $u \in H^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$, on écrit la contrainte sous la forme :

$$\beta(u) = \int_{\mathcal{D}} |u|^2. \tag{3.2.6}$$

On veut imposer $\beta(u) = 1$. Pour cela on défini l'espace tangent à la contrainte

$$\begin{aligned} T_{u,H_A} &= \{\omega \in H_A, \ \beta'(u) \cdot \omega = 0\} \\ &= \{\omega \in H_A, \ \mathcal{R}e\left(\langle u, \omega \rangle_{L^2}\right) = 0\}. \end{aligned}$$

T_{u,H_A} est un sous-espace vectoriel fermé de H_A et pour tout $u \in H_A$, il existe une unique projection orthogonale $P_{u,H_A} : H_A \to T_{u,H_A}$. Soit $u_0 \in H_A$ tel que $\beta(u_0) = 1$. Alors si on considère le flot de gradient $z(t)$ qui appartient à H_A pour tout t et tel que :

$$\begin{cases} z(0) = u_0, \\ z'(t) = -P_{z(t),H_A} \nabla_{H_A} E(z(t)), \end{cases} \tag{3.2.7}$$

alors

$$\beta(z(t))' = \beta'(z(t)) \cdot z'(t) = -\beta'(z(t)) \cdot P_{z(t),H_A} \nabla_{H_A} E(z(t)) = 0, \tag{3.2.8}$$

car le gradient projeté appartient à l'espace tangent T_{u,H_A}. Donc

$$\beta(z(t)) = \beta(u_0) = 1, \ \forall t > 0. \tag{3.2.9}$$

Ainsi pour tout $t \geq 0$, on conserve la propriété de la solution d'être de norme 1. On note par $\mathcal{G} = \nabla_{H_A} E(u)$ le gradient de Sobolev de E pris en u. Le gradient projeté doit alors vérifier (Danaila and Kazemi, 2010) :

$$P_{u,H_A} \mathcal{G} = \mathcal{G} - \frac{\mathcal{R}e\left(\langle u, \mathcal{G}\rangle_{L^2}\right)}{\mathcal{R}e\left(\langle u, v_{H_A}\rangle_{L^2}\right)} v_{H_A}, \tag{3.2.10}$$

où $v_{H_A} \in H_A$ est défini par :

$$\langle v_{H_A}, h\rangle_{H_A} = \langle u, h\rangle_{L^2}, \ \forall h \in H_A. \tag{3.2.11}$$

Par rapport à la méthode de descente présentée dans Danaila and Kazemi (2010); Danaila and Hecht (2010), où un pas de descente fixe a été utilisé, nous optimisons le pas de descente à chaque itération. Les méthodes de recherche linéaire traditionnelles (Brent, Armijo, etc) se sont révélées trop coûteuses en temps de calcul. Nous avons donc utilisé une recherche du pas de descente optimal spécifique à notre problème. Le minimum α_n de la fonction réelle :

$$J_n(\alpha) = E(u_n - \alpha\, \mathcal{G}_n), \quad \alpha > 0. \tag{3.2.12}$$

est une racine du polynôme de degré trois :

$$J_n'(\alpha) = c_3\alpha^3 + c_2\alpha^2 + c_1\alpha + c_0, \tag{3.2.13}$$

avec les coefficients

$$\begin{aligned}
c_3 &= 2C_g \int_{\mathcal{D}} |\mathcal{G}_n|^4, \\
c_2 &= -6C_g \int_{\mathcal{D}} |\mathcal{G}_n|^2\, \Re\left(\langle u_n, \mathcal{G}_n\rangle\right), \\
c_1 &= \int_{\mathcal{D}} |\nabla \mathcal{G}_n|^2 + 2C_{\text{trap}}|\mathcal{G}_n|^2 + 2C_g|u_n|^2|\mathcal{G}_n|^2 + 4C_g\Re\left(\langle u_n, \mathcal{G}_n\rangle\right)^2 - 2C_\Omega \Re\left(i\mathcal{G}_n^* \mathbf{A}^t \nabla \mathcal{G}_n\right), \\
c_0 &= -\int_{\mathcal{D}} \Re\left(\langle \nabla u_n, \nabla \mathcal{G}_n\rangle\right) + 2\Re\left(\langle u_n, \mathcal{G}_n\rangle\right)\left[C_{\text{trap}} + C_g|u_n|^2\right] - 2C_\Omega \Re\left(i\mathcal{G}_n^* \mathbf{A}^t \nabla u_n\right).
\end{aligned}$$

Dans FreeFem++, on peut utiliser la fonction **polycomplexsolve** de la bibliothèque **GSL** (Galassi et al., 2015) pour calculer les trois racines du polynôme $J_n'(\alpha)$ et sélectionner celle qui réalise le minimum de $J_n(\alpha)$.

On résume maintenant l'algorithme de la méthode de descente. Toutes les variables sont discrétisées en utilisant des éléments finis P_1 ; le terme non linéaire est représenté en utilisant des éléments finis P_4 en 2D et P_2 en 3D.

1. Supposons que la solution u_n à l'itération n a été construite. On construit $G = \nabla_{H_A} E(u_n)/(2\varepsilon)$, solution du problème variationel correspondant à (3.2.4) et (3.2.5) :
   $\forall v \in H_0^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$,

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathcal{D}} \Re\left[\left(1 + C_\Omega^2(x^2+y^2)\right)\langle G, v\rangle + \langle \nabla G, \nabla v\rangle - 2iC_\Omega\langle \mathbf{A}^t \nabla G, v\rangle\right] \\
&= \int_{\mathcal{D}} \Re\left[\frac{1}{2}\langle \nabla u_n, \nabla v\rangle + \left\langle\left[C_{\text{trap}} u_n + C_g|u_n|^2 u_n - iC_\Omega \mathbf{A}^t \nabla u_n\right], v\right\rangle\right].
\end{aligned}$$

2. On construit la projection de G sur l'espace tangent à la contrainte de norme unitaire (voir (Danaila and Kazemi, 2010)) :

$$P_{u_n,H_A}G = G - \frac{\Re\left(\langle u_n, G\rangle_{L^2}\right)}{\Re\left(\langle u_n, v_{H_A}\rangle_{L^2}\right)} v_{H_A}, \tag{3.2.14}$$

où v_{H_A} est solution du problème variationnel :

$$\langle v_{H_A}, v\rangle_{H_A} = \langle u_n, v\rangle_{L^2}, \ \forall v \in H_A. \tag{3.2.15}$$

3. On construit le pas de descente optimal :

$$\chi_n = \min_{\chi>0} E(u_n - \chi\, P_{u_n,H_A}G), \tag{3.2.16}$$

en trouvant les racines du polynôme d'ordre trois (3.2.13). Le facteur (2ε) qui apparaît dans l'expression du gradient (3.2.5) a été inclus dans l'expression du pas de descente optimal $\chi = (2\varepsilon)\alpha$.

4. On construit la solution u_{n+1} à l'iteration $n+1$:

$$u_{n+1} = u_n - \chi_n\ P_{u_n,H_A}G.$$

5. A la fin, on calcule l'erreur relative

$$\delta E_{n+1} = \frac{E(u_{n+1}) - E(u_n)}{E(u_{n+1})} \tag{3.2.17}$$

et on appelle l'algorithme d'adaptation de maillage suggéré dans (Danaila and Hecht, 2010) (voir le paragraphe suivant). La convergence vers l'état stationnaire est assurée quand $\delta E_{n+1} < \varepsilon_c = 10^{-9}$.

3.2.2. Adaptation de maillage

FreeFem++ contient un puissant outil (la fonction **adaptmesh**) pour l'adaptation de maillage isotrope et anisotrope qui utilise l'algorithme de contrôle de la métrique décrit dans Vallet (1992); Borouchaki et al. (1996); Castro-Diaz et al. (2000); Hecht and Mohammadi (1997); George and Borouchaki (1998). L'idée principale est de définir une métrique basée sur le calcul de la Hessienne de la solution et d'utiliser une procédure de Delaunay pour construire un nouveau maillage tel que toutes les arrêtes soient de longueur 1 dans la nouvelle métrique. Dans la méthode de descente, on appelle cette fonction après avoir construit u_{n+1} à l'étape 4 de l'algorithme précédent. Puisque notre critère de convergence est basé sur la variation relative de l'énergie de la solution (δE_{n+1}), on utilise le même indicateur pour lancer l'adaptation de maillage en utilisant l'algorithme suivant (voir aussi (Danaila and Hecht, 2010)) :

1. Choisir une suite $\varepsilon^i \geq \varepsilon_c$ de valeurs décroissantes, qui représentent des valeurs de seuil pour l'adaptation de maillage ;
2. soit $i = 1$;
3. si δE_{n+1} est décroissante et $\varepsilon^{i+1} < \delta E_{n+1} < \varepsilon^i$ et $\delta E_n > \varepsilon_c$, appeler la procédure d'adaptation de maillage ; la solution u est interpolée sur le nouveau maillage et normalisée pour satisfaire la contrainte de norme unitaire ;
4. si δE_{n+1} est croissant, *i. e.* de grandes variations de l'énergie apparaissent (cela peut se produire quand de nouveaux vortex entrent dans le domaine), on reconsidère la borne précédente en revenant au valeurs $(i-1)$;
5. si l'étape 3 a été réalisée $N_{ad} \geq 1$ fois, on passe de i à $i+1$. Limiter le nombre de raffinements de maillage à chaque seuil est nécessaire car à l'étape 2, l'interpolation sur le nouveau maillage et la normalisation de la solution peut augmenter la valeur de δE_{n+1}.

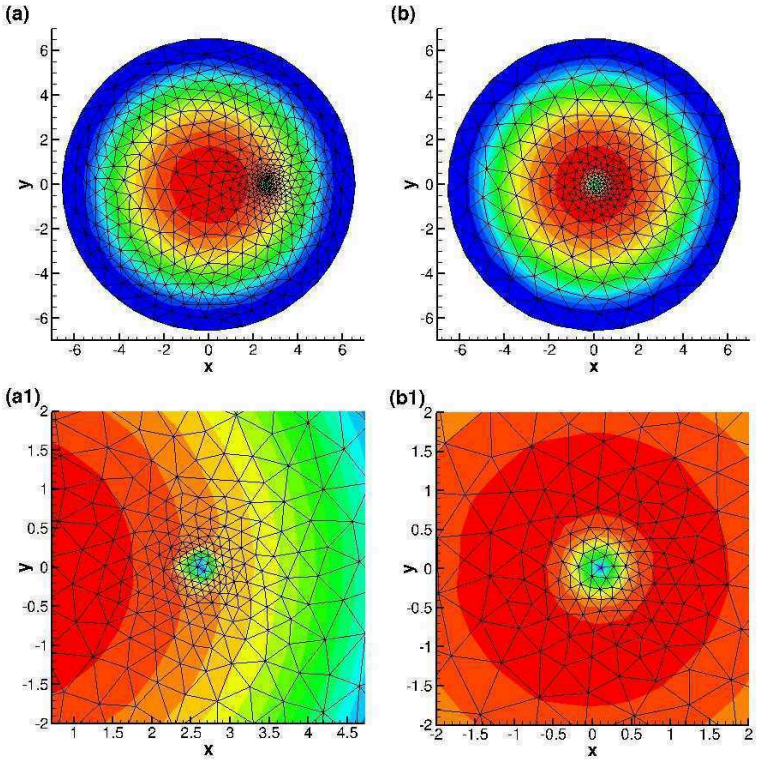


FIGURE 3.5.: Illustration de l'adaptation de maillage en 2D. Cas test dont l'état initial (a) contient un vortex décentré et l'état final (stationnaire) un vortex central (b). Le raffinement de maillage suit le déplacement du vortex (agrandissement de la zone autour du vortex sur les figures (a1) et (b1)).

La figure 3.5 illustre la procédure d'adaptation de maillage en 2D. Elle présente un cas test où la solution initiale a un vortex décentré (les détails des paramètres pour ce test sont donnés dans la partie 3.4.2). On trace sur la figure 3.5(a) l'état initial construit avec l'approximation de Thomas-Fermi. Sur la figure 3.5(b) on trace la solution finale convergée avec la méthode de gradient de Sobolev. Un agrandissement de la zone autour du vortex est présenté sur les figures 3.5 (a1) et (b1). Observons que l'adaptation de maillage génère un maillage plus dense autour du centre du vortex. D'un autre coté, le nombre de triangles est réduit dans la zone proche du bord où la solution varie peu. Cependant, le fait de construire des mailles plus grandes doit être traité avec attention pour des rotations rapides car de nouveaux vortex peuvent être nucléés proche du bord. Il a été montré dans (Danaila and Hecht, 2010) que cette procédure réduit le temps de calcul CPU et le nombre d'itérations par rapport à une simulation avec un maillage fixe.

Pour les calculs en 3D, FreeFem++ utilise la fonction **mshmet** (C. Dapogny and Frey, 2014) pour construire la métrique et la fonction **mmg3d** (Dobrzynski and Frey, 2012) pour construire le nouveau maillage correspondant. Sur la figure 3.6, on trace un maillage en 3D adapté à une solution présentant une ligne de vortex en forme de S. La visualisation a été réalisée avec **medit**, un logiciel de visualisation de maillage (Frey, 2001a) interfacé avec FreeFem++. Le maillage suit la ligne de vortex en ajoutant des tétraèdres pour une meilleure précision. En dehors de la zone entourant le vortex, l'adaptation de maillage nous a permis de réduire le nombre de tétraèdres, en augmentant leur taille.

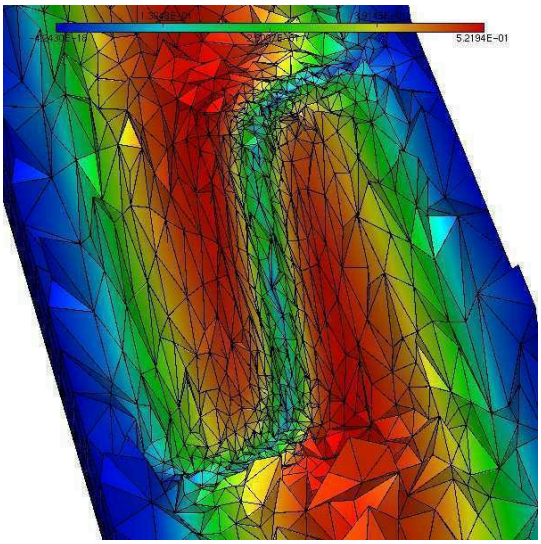


FIGURE 3.6.: Illustration de l'adaptation de maillage en 3D. Cas test de construction d'un minimum pour une configuration avec une unique ligne de vortex ayant une forme de S.

3.3. Minimisation de l'énergie avec la bibliothèque d'optimisation Ipopt

La bibliothèque d'optimisation Ipopt utilise une méthode de minimisation de point intérieur (Wächter, 2002), une méthode de barrière (J. Nocedal and Waltz, 2008) et un filtre de recherche linéaire (Wächter and Biegler, 2006). Cette bibliothèque efficace a été interfacée dans FreeFem++ (Auliac, 2014) et offre la possibilité de résoudre des problèmes d'optimisation de la forme :

$$\text{trouver } \mathbf{x_0} = \underset{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}}(f(\mathbf{x})), \tag{3.3.1}$$

$$\text{tel que } \begin{cases} \forall i \leq n,\ x_i^{lb} \leq x_i \leq x_i^{ub} \text{ (bornes simples)}, \\ \forall i \leq m,\ c_i^{lb} \leq c_i(\mathbf{x}) \leq c_i^{ub} \text{ (fonctions de contraintes)}, \end{cases} \tag{3.3.2}$$

où lb correspond à *lower bound* et ub à *upper bound*. Si pour un $i \leq m$, $c_i^{lb} = c_i^{ub}$ on obtient une contrainte d'égalité. Pour la minimisation de l'énergie de Gross-Pitaevskii, l'utilisation de Ipopt est assez simple : la contrainte de conservation (2.3.8) est une contrainte d'égalité et par conséquent $m = 1$ et $c^{lb} = c^{ub} = 1$ dans le problème général précédent. Ipopt résout l'équation d'Euler-Lagrange associée au problème : (3.3.1)-(3.3.2) :

$$\begin{cases} \nabla f(\mathbf{x}) + \lambda\, \nabla c(\mathbf{x}) = 0, \\ c(\mathbf{x}) = 0, \end{cases} \tag{3.3.3}$$

où $\lambda \in \mathbb{R}$ est un multiplicateur de Lagrange et $c(\mathbf{x})$ la contrainte. Notons que dans notre cas, λ correspond au potentiel chimique. Soit

$$L(\mathbf{x}, \lambda) := f(\mathbf{x}) + \lambda\, c(\mathbf{x}). \tag{3.3.4}$$

Ipopt trouve d'abord une direction de descente ($\mathbf{dx}$, $d\lambda$) en utilisant la méthode de Newton. En effet, à chaque itération n Ipopt résout le système :

$$\begin{pmatrix} \nabla^2 L(\mathbf{x_n}, \lambda_n) & \nabla c(\mathbf{x_n}) \\ \nabla c(\mathbf{x_n}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{dx} \\ d\lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \nabla L(\mathbf{x_n}, \lambda_n) \\ c(\mathbf{x_n}) \end{pmatrix}. \tag{3.3.5}$$

Puis on avance à l'étape suivante :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x_{n+1}} \\ \lambda_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{x_n} \\ \lambda_n \end{pmatrix} + \alpha_n \begin{pmatrix} \mathbf{dx} \\ d\lambda \end{pmatrix}$$

où $\alpha_n \in (0,1]$ est construit en utilisant la méthode de recherche linéaire filtrée décrite dans (Wächter and Biegler, 2006).
L'algorithme s'arrête soit quand le nombre d'itérations atteint une valeur maximale fixée par l'utilisateur, soit quand l'erreur de convergence

$$\varepsilon_n = \max\left(\|\nabla f(\mathbf{x_n}) + \lambda_n \nabla c(\mathbf{x_n})\|_\infty,\ \|c(\mathbf{x_n})\|_\infty\right) \tag{3.3.6}$$

est inférieur à une certaine valeur fixée par l'utilisateur.

Comme Ipopt recherche des solutions dans $\mathbb{R}^n, n \in \mathbb{N}$, il faut séparer la partie imaginaire et la partie réelle dans l'expression de l'énergie de Gross-Pitaevskii. Le problème à résoudre devient alors :

$$\text{trouver } [u_r, u_i] \in (H_0^1(\mathcal{D}, \mathbb{R}))^2 \text{ qui minimise}$$

$$E(u_r, u_i) = \int_{\mathcal{D}} \left[\frac{1}{2}|\nabla u_r|^2 + \frac{1}{2}|\nabla u_i|^2 + C_{trap}\,(u_r^2 + u_i^2) + \frac{1}{2}\,C_g\,(u_r^2 + u_i^2)^2\right] - C_\Omega\, L_z(u_r, u_i), \tag{3.3.7}$$

où

$$L_z(u_r, u_i) = \int_{\mathcal{D}} \left[y\left(\frac{\partial u_r}{\partial x}\,u_i - \frac{\partial u_i}{\partial x}\,u_r\right) - x\left(\frac{\partial u_r}{\partial y}\,u_i - \frac{\partial u_i}{\partial y}\,u_r\right)\right]. \tag{3.3.8}$$

On peut alors calculer la dérivée directionnelle au sens de Gâteaux de E :

$$\begin{aligned} E'(u_r, u_i)\cdot[v_r, v_i] = &\int_{\mathcal{D}} [\nabla u_r \cdot \nabla v_r + \nabla u_i \cdot \nabla v_i + 2\,C_{trap}\,(u_r\,v_r + u_i\,v_i)] \\ &+ 2\,C_g \int_{\mathcal{D}} (u_r^2 + u_i^2)\,(u_r\,v_r + u_i\,v_i) \\ &- C_\Omega L_z'(u_r, u_i)\cdot[v_r, v_i], \end{aligned} \tag{3.3.9}$$

avec

$$\begin{aligned} -L_z'(u_r, u_i)\cdot[v_r, v_i] = &\int_{\mathcal{D}} y\left[-\frac{\partial u_r}{\partial x}\,v_i + \frac{\partial u_i}{\partial x}\,v_r - \frac{\partial v_r}{\partial x}\,u_i + \frac{\partial v_i}{\partial x}\,u_r\right] \\ &+ \int_{\mathcal{D}} x\left[\frac{\partial u_r}{\partial y}\,v_i - \frac{\partial u_i}{\partial y}\,v_r + \frac{\partial v_r}{\partial y}\,u_i - \frac{\partial v_i}{\partial y}\,u_r\right]. \end{aligned} \tag{3.3.10}$$

Finalement, le calcul de la dérivée seconde au sens de Gâteaux de E donne :

$$\begin{aligned} E''(u_r, u_i)\cdot([v_r, v_i], [w_r, w_i]) = &\int_{\mathcal{D}} [\nabla v_r \cdot \nabla w_r + \nabla v_i \cdot \nabla w_i + 2\,C_{trap}\,(v_r\,w_r + v_i\,w_i)] \\ &+ 2\,C_g \int_{\mathcal{D}} [(u_r^2 + u_i^2)\,(v_r\,w_r + v_i\,w_i)] \\ &+ 4\,C_g \int_{\mathcal{D}} [(u_r\,v_r + u_i\,v_i)\,(u_r\,w_r + u_i\,w_i)] \\ &- C_\Omega L_z''(u_r, u_i)\cdot([v_r, v_i], [w_r, w_i]), \end{aligned} \tag{3.3.11}$$

avec

$$-L_z''(u_r,u_i)\cdot([v_r,v_i],[w_r,w_i]) = \int_{\mathcal{D}} y\left[-\frac{\partial w_r}{\partial x}\,v_i + \frac{\partial w_i}{\partial x}\,v_r - \frac{\partial v_r}{\partial x}\,w_i + \frac{\partial v_i}{\partial x}\,w_r\right] + \int_{\mathcal{D}} x\left[\frac{\partial w_r}{\partial y}\,v_i - \frac{\partial w_i}{\partial y}\,v_r + \frac{\partial v_r}{\partial y}\,w_i - \frac{\partial v_i}{\partial y}\,w_r\right]. \tag{3.3.12}$$

L'expression de la contrainte devient :

$$c(u_r,u_i) = \int_{\mathcal{D}} (u_r^2+v_r^2) - 1, \tag{3.3.13}$$

et son gradient :

$$\nabla c(u_r,u_i)\cdot[v_r,v_i] = 2\int_{\mathcal{D}} (u_r\,v_r + u_i\,v_i). \tag{3.3.14}$$

3.3.1. Algorithme utilisé pour incorporer l'adaptation de maillage

La bibliothèque Ipopt reçoit en arguments d'entrée des vecteurs de $\mathbb{R}^n, n\in\mathbb{N}$, ce qui nous empêche d'utiliser l'adaptation de maillage directement à l'intérieur de l'algorithme de minimisation. À la place, nous alternons la construction du minimum et l'adaptation de maillage en suivant l'algorithme ci-dessous :
Soit n_{adapt}, le nombre total de raffinements de maillage à réaliser et ε_0 et $\varepsilon_{\text{adapt}}$, la première et la dernière précision à atteindre dans l'adaptation de maillage (paramètre de la fonction **adaptmesh** de FreeFem++).

1. À l'étape $k\in[0,n_{\text{adapt}}-1]$, lancer Ipopt pour trouver une solution $[u_r^k,u_i^k]$.
2. Construire un nouveau maillage adapté à $[u_r^k,u_i^k]$ avec la précision dans l'adaptation de maillage
$$\varepsilon_k = \varepsilon_0\left(\frac{\varepsilon_{\text{adapt}}}{\varepsilon_0}\right)^{k/(n_{\text{adapt}}-1)}. \tag{3.3.15}$$
3. Aller à l'étape $k+1$.

Des valeurs typiques pour la résolution en 2D sont $n_{\text{adapt}}=4$, $\varepsilon_0=0.1$ et $\varepsilon_{\text{adapt}}=0.005$. Pour les cas 3D, comme la construction de solutions est plus difficile, il est plus commode de réaliser un plus grand nombre d'adaptations de maillage avec un plus petit rapport $\varepsilon_{\text{adapt}}/\varepsilon_0$. Des valeurs typiques sont $n_{\text{adapt}}=6$, $\varepsilon_0=0.01$ et $\varepsilon_{\text{adapt}}=0.005$.

3.3.2. Comparaison avec la méthode de gradient de Sobolev

On considère deux cas tests en 2D pour effectuer une comparaison entre la méthode de gradient de Sobolev et la méthode d'optimisation utilisant la bibliothèque Ipopt.

Cas test avec un potentiel harmonique et un vortex initial décentré. Pour ce premier exemple de comparaison, on considère un potentiel harmonique avec $a_x=a_y=1$ et $C_g=500$. Il s'agit d'un cas étudié dans (Aftalion, 2006) où il a été montré qu'en dessous d'une certaine vitesse de rotation critique C_{Ω_0} l'état fondamental ne présente aucun vortex. Il existe une seconde vitesse de rotation critique C_{Ω_1} au dessus de laquelle l'état fondamental présente un vortex en son centre. De plus, pour $C_{\Omega_0}<C_\Omega<C_{\Omega_1}$ le condensat présentant un vortex central est un état méta-stable (minimum local) et l'état fondamental (minimum global) ne contient aucun

vortex. En utilisant la méthde de gradient de Sobolev on estime que dans ce cas $C_{\Omega_0} \simeq 0.17$ et $C_{\Omega_1} \simeq 0.22$.

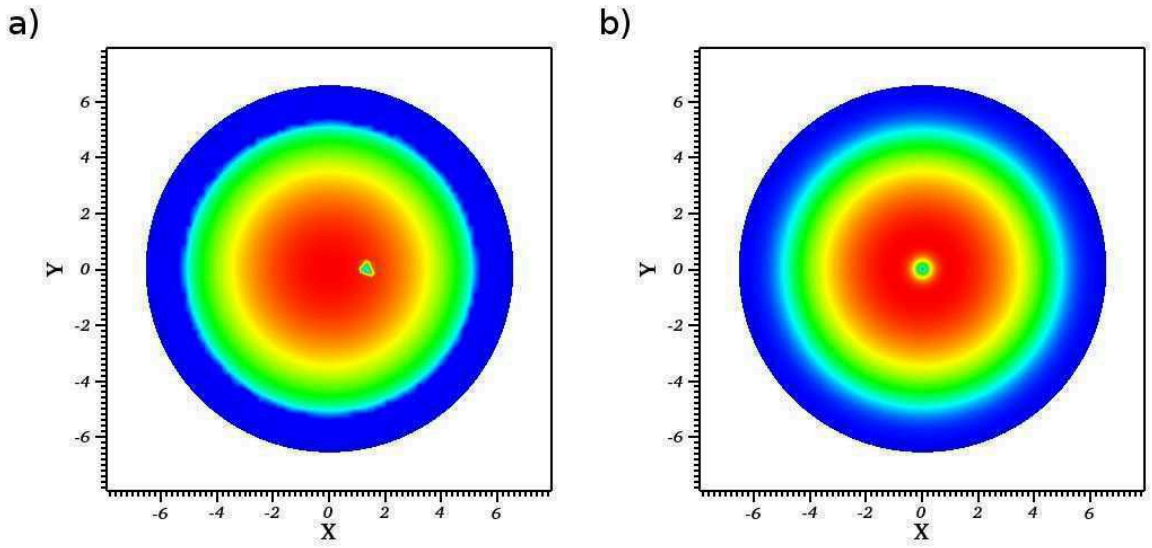


FIGURE 3.7.: Condensat avec un potentiel harmonique et vortex centré : a) contour de densité $\rho = |u|^2$ de l'approximation initiale construite avec le modèle de Thomas-Fermi et un modèle de vortex décentré. b) Solution finale obtenue avec Ipopt.

Dans un premier temps, on compare les performances de la méthode de gradient de Sobolev avec Ipopt pour $C_\Omega = 0.4 > C_{\Omega_1}$, donc dans un cas où l'état fondamental présente un vortex en son centre. La condition initiale est construite en utilisant l'approximation de Thomas-Fermi. On rajoute un modèle de vortex décentré comme l'illustre la figure 3.7.a. Comme l'adaptation de maillage est primordiale dans nos méthodes de résolution, on n'effectue pas la comparaison sur des maillages fixes, mais sur des maillages qui sont adaptés à la solution. Avec la méthode de gradient de Sobolev on obtient une solution finale précise avec une erreur de convergence de 10^{-9} dans (3.2.17), qui sera notre référence de comparaison, présentant un vortex en son centre. Elle est calculée en 122.08s en temps CPU et a l'énergie finale de 8.36886. On part d'un maillage présentant 100 segments sur le bord externe, soit 943 nœuds. On considère plusieurs erreurs de précision $\varepsilon_{\text{adapt}}$ (3.3.15) dans l'adaptation de maillage et neuf seuils de tolérance pour l'erreur de convergence ε_n (3.3.6) de Ipopt. Comme pour le calcul avec la méthode de gradient de Sobolev, Ipopt converge vers une solution avec le vortex centré, comme l'illustre l'image de droite de la figure 3.7. Qualitativement on obtient donc la même solution dans tous les cas considérés.
Pour comparer quantitativement les solutions obtenues avec Ipopt et la solution de référence obtenue avec la méthode de gradient, on compare les niveaux d'énergie, la norme L^∞ ainsi que la norme H^1 des solutions finales.

On présente dans le tableau 3.3 les résultats obtenus. Tout d'abord, on observe qu'avec la méthode utilisant Ipopt on obtient avec une erreur de convergence $\varepsilon_n = 10^{-4}$ et une erreur dans l'adaptation de maillage $\varepsilon_{\text{adapt}} = 0.1$ (donc un maillage assez grossier), un niveau d'énergie légèrement plus bas que celui obtenu avec la méthode de gradient de Sobolev et en un temps CPU très court (17.27s). De plus, la solution finale est déjà très proche de celle obtenue avec la

méthode de gradient, étant donné que la différence en norme L^∞ est de l'ordre de 10^{-4} et celle en norme H^1 de 10^{-3}. On voit ensuite que le gain dans la minimisation de l'énergie obtenu en diminuant ε_n et $\varepsilon_{\text{adapt}}$ est faible. En effet, l'énergie finale obtenue pour $\varepsilon_n = 10^{-13}$ et $\varepsilon_{\text{adapt}} = 0.005$ n'est inférieur que de $4{\cdot}10^{-4}$ à celle obtenue avec une erreur ε_n de 10^{-4} et une erreur $\varepsilon_{\text{adapt}}$ de 0.1. L'état fondamental a donc dans ce cas été ciblé rapidement par Ipopt, malgré une faible précision demandée dans les paramètres d'erreur ε_n et $\varepsilon_{\text{adapt}}$. Cependant, le fait de diminuer les paramètres d'erreur ε_n et $\varepsilon_{\text{adapt}}$ a permis de s'approcher de l'état fondamental en norme L^∞ et en norme H^1. En effet la différence en norme L^∞ et H^1 entre les solutions obtenues avec Ipopt et la solution de référence augmente au fur et à mesure que l'erreur demandée diminue. Donc, comme parallèlement le niveau d'énergie atteint diminue, on peut en déduire qu'on se rapproche de l'état fondamental en norme L^∞ et H^1. On constate donc, sur ce cas test, que la méthode utilisant Ipopt est plus rapide que celle du gradient de Sobolev et qu'elle converge vers une solution plus proche de l'état fondamental.

M	100					
ε_n	$\varepsilon_{\text{adapt}}$	CPU	E	$E_{Ip} - E_{G_A}$	Δ_{L^∞}	Δ_{H^1}
0.001	0.1	17.27s	8.36491	-0.00399151	0.000274619	0.00340548
1e-07	0.05	25.25s	8.36323	-0.00566584	0.00126523	0.00416434
1e-10	0.02	39.42s	8.36198	-0.00691464	0.00189125	0.00483825
1e-13	0.005	72.17s	8.36095	-0.00795124	0.00213434	0.00559401

TABLE 3.3.: Condensat avec un potentiel harmonique et vortex centré : Évaluation du calcul avec Ipopt (Ip) par rapport à une solution de référence calculée avec la méthode de gradient de Sobolev (G_A). $\Delta_{L^\infty} = |\|u_{Ip}\|_{L^\infty} - \|u_{G_A}\|_{L^\infty}|$ et $\Delta_{H^1} = |\|u_{Ip}\|_{H^1} - \|u_{G_A}\|_{H^1}|$

Dans un second temps, on teste la capacité de Ipopt à converger vers un minimum local proche de la condition initiale. Pour cela, on prend $C_{\Omega_0} < C_\Omega = 0.22 < C_{\Omega_1}$. On est donc dans la situation où l'état fondamental ne contient pas de vortex et où il existe un minimum local contenant 1 vortex. La méthode de gradient de Sobolev nous permet de situer le niveau d'énergie de l'état fondamental à 8.5139 et celui du minimum local à 8.56648. On fixe les erreurs $\varepsilon_n = 1e-13$ et $\varepsilon_{\text{adapt}} = 0.005$. On construit une condition initiale avec l'approximation de Thomas-Fermi dans laquelle est planté un modèle de vortex. Pour différencier plusieurs cas, on fait varier la distance entre le modèle de vortex et le centre du condensat d_V allant de 0 à $0.6R_C$ avec R_C le rayon du condensat. Les conditions initiales pour lesquelles le vortex planté est proche du centre sont supposés mener à une convergence vers le minimum local contenant un vortex en son centre. Alors que celles dont le vortex implanté est suffisamment loin du centre sont supposés mener à une convergence vers l'état fondamental sans vortex.

Dans le tableau 3.4 on présente le nombre de vortex présents dans la solution finale, le temps CPU et le niveau d'énergie atteint pour les différentes positions du modèle de vortex considérées dans la condition initiale. On remarque que, lorsque le modèle de vortex est positionné à une distance par rapport au centre inférieure à la moitié du rayon du condensat, (*i. e.* $d_V < 0.5R_C$) Ipopt converge vers l'état méta-stable. Lorsque le vortex est positionné à plus de la moitié du rayon du condensat (i.e. $d_V > 0.5R_C$), Ipopt converge vers l'état fondamental sans vortex. De plus, dans le cas où $d_V < 0.5R_C$, plus d_V est grand, plus Ipopt prend du temps pour converger vers l'état final et inversement dans le cas $d_V > 0.5R_C$, plus d_V est petit plus Ipopt est lent à atteindre la convergence. La méthode d'optimisation utilisant Ipopt permet donc bien dans ce cas de trouver une solution finale proche de l'état initial considéré. Et elle est atteinte plus rapidement si la condition initiale est proche de l'état stationnaire ciblé.

Position vortex	N_v fin	CPU	E_{Ip}
centre	1	6.8s	8.56326
$0.1R_C$	1	9.2s	8.56326
$0.2R_C$	1	83.74s	8.56326
$0.4R_C$	1	150.53s	8.5633
$0.5R_C$	0	78.85s	8.51201
$0.6R_C$	0	36.67s	8.51201
∞	0	14.67s	8.51201

TABLE 3.4.: Condensat avec un potentiel harmonique et vortex centré : Étude de l'influence de la condition initiale sur l'état final trouvé avec Ipopt.

Cas test avec un potentiel quartique+quadratique. On considère un second cas test de comparaison avec un potentiel quartique+quadratique de coefficients $a_x = a_y = 1$ et $a_4 = 0.5$, $C_\Omega = 2$ et $C_g = 500$. La condition initiale est construite comme une approximation de Thomas-Fermi dans laquelle un cercle de six modèles de vortex a été implanté. Trois tailles de maillage initial ont été considérées, définies par le nombre de segments sur le bord M. Cinq seuils d'erreur pour l'adaptation de maillage $\varepsilon_{\text{adapt}}$ (3.3.15) et neuf seuils de tolérance pour l'erreur de convergence ε_n (3.3.6) de Ipopt ont été testés. La méthode de gradient de Sobolev converge vers un état méta-stable proche de l'état initial. En effet, on obtient une solution contenant six vortex répartis sur un cercle. Pour une erreur de convergence (3.2.17) de 10^{-6}, on atteint un niveau d'énergie de 11.878 en 30,52 secondes de temps CPU.

M	50						
Sol	ε_n	$\varepsilon_{\text{adapt}}$	CPU	E_{Ip}	$E_{Ip} - E_{G_A}$	Δ_{L^∞}	Δ_{H^1}
N°1	0.001	0.1	6.05s	12.0169	0.140255	0.00318221	0.0514565
N°1	1e-05	0.1	14.67s	11.8855	0.00882726	9.91233e-06	0.005499
N°1	1e-08	0.05	31.01s	11.8398	-0.0369191	0.00154222	0.013833
N°2	1e-09	0.02	1314.22s	11.0725	-0.80419	0.0116916	1.32474
N°2	1e-13	0.005	1698.04s	11.0496	-0.827056	0.0121995	1.32803
M	100						
Sol	ε_n	$\varepsilon_{\text{adapt}}$	CPU	E	$E_{Ip} - E_{G_A}$	Δ_{L^∞}	Δ_{H^1}
N°1	0.001	0.1	14.11s	11.9505	0.0737989	0.00386598	0.0206899
N°3	1e-05	0.1	76.71s	11.5873	-0.289404	0.00249817	0.270293
N°3	1e-11	0.01	186.3s	11.5129	-0.363764	0.00482825	0.268156
N°4	1e-12	0.01	2499.95s	11.0525	-0.824204	0.0111045	1.0752
N°4	1e-13	0.005	2608.39s	11.0498	-0.82685	0.0113489	1.07545
M	200						
Sol	ε_n	$\varepsilon_{\text{adapt}}$	CPU	E	$E_{Ip} - E_{G_A}$	Δ_{L^∞}	Δ_{H^1}
N°4	0.001	0.1	111.67s	11.1744	-0.702333	0.00942324	1.17765
N°4	1e-09	0.02	252.28s	11.0496	-0.827113	0.0118046	1.21589
N°4	1e-13	0.005	1265.17s	11.0318	-0.844849	0.0123163	1.21765

TABLE 3.5.: Condensat calculé avec potentiel quartique+quadratique et une condition initiale avec 6 vortex : Comparaison de Ipopt avec le gradient de Sobolev. $\Delta_{L^\infty} = |\|u_{Ip}\|_{L^\infty} - \|u_{G_A}\|_{L^\infty}|$ et $\Delta_{H^1} = |\|u_{Ip}\|_{H^1} - \|u_{G_A}\|_{H^1}|$.

Le tableau 3.5 présente les résultats obtenus en partant du maillage le plus grossier contenant 50 segments sur le bord. Jusqu'à une erreur de convergence $\varepsilon_n = 10^{-8}$ imposée à Ipopt, on atteint une solution comparable à celle obtenue avec la méthode de gradient que l'on note solution N°1. En effet, pour $\varepsilon_n = 10^{-5}$ et $\varepsilon_{\text{adapt}} = 0.1$, on atteint un niveau d'énergie proche à $8 \cdot 10^{-3}$ prés de l'énergie obtenue avec la méthode de gradient et les solutions approchées correspondantes sont égales en norme L^∞ à 10^{-5} près et en norme H^1 à $5 \cdot 10^{-3}$ près. Comme le montre la figure 3.8, cette solution N°1 présente toujours 6 vortex. Cependant, lorsque l'on demande une erreur $\varepsilon_n = 10^{-8}$ à Ipopt sur des maillages adaptés avec une erreur $\varepsilon_{\text{adapt}}$ plus faible, on obtient une solution à un niveau d'énergie beaucoup plus bas allant de 11.0725 à 11.0496 que l'on note solution N°2. Cette solution est éloignée de la solution N°1 obtenue avec la méthode de gradient. La différence en norme H^1 entre les deux solutions est de 1.32, ce qui est considérable. De plus, la solution N°2 obtenue avec Ipopt présente 13 vortex répartis sur deux cercles comme le montre la figure 3.8. On converge ainsi vers un autre état méta-stable, éloigné de la condition initiale mais se trouvant à un niveau d'énergie plus bas que l'état méta-stable atteint avec la méthode de gradient.

Dans le cas d'un maillage initial plus fin, contenant 100 segments sur le bord, Ipopt converge vers la solution N°1 obtenue avec le gradient de Sobolev si on lui demande une erreur de convergence ε_n de l'ordre de 10^{-3} combinée avec une erreur dans l'adaptation de maillage $\varepsilon_{\text{adapt}} = 0.1$. Mais, à partir d'une erreur $\varepsilon_n = 10^{-5}$, la solution trouvée est à un niveau d'énergie intermédiaire, plus bas que la solution N°1 mais plus élevé que la solution N°2 à 13 vortex trouvée précédemment. Cette solution N°3 est à un niveau d'énergie allant de 11.5873 à 11.5129 et est représentée sur la figure 3.8. Elle présente un vortex central entouré d'un cercle de six vortex. Il s'agit d'un nouvel état méta-stable. Dans le tableau 3.5, pour $M = 100$, on observe ensuite qu'un autre état méta-stable est atteint quand $\varepsilon_n = 10^{-12}$ et $\varepsilon_{\text{adapt}} = 0.01$, ou $\varepsilon_n = 10^{-13}$ et $\varepsilon_{\text{adapt}} = 0.005$. Le niveau d'énergie atteint est très proche de celui de la solution à 13 vortex, à 10^{-4} prés. Cependant, cette solution montrée sur la figure 3.8 et que l'on note solution N°4 ne présente pas 13 mais 12 vortex. Il s'agit d'un quatrième minimum local de l'énergie.

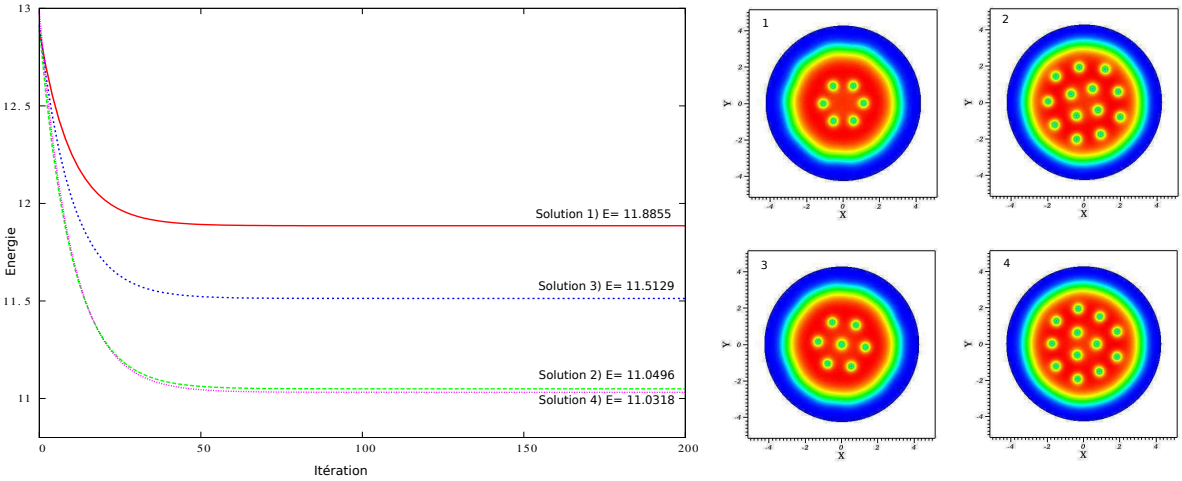


FIGURE 3.8.: Condensat calculé avec potentiel quartique+quadratique et une condition initiale avec 6 vortex : Schéma de l'évolution de l'énergie pour les solution 1,2,3 et 4 décrites dans le tableau 3.5, et visualisation de la densité pour les solutions correspondantes.

Dans le tableau 3.5 on présente les niveaux d'énergie des solution atteintes avec Ipopt en partant d'un maillage initial fin contenant 200 segments sur le bord. Quelque soit la tolérance demandée pour l'erreur de convergence de Ipopt, on atteint une solution à un niveau d'énergie inférieur à 11.2 qui présente 12 vortex. Il s'agit une nouvelle fois du quatrième état méta-stable rencontré précédemment et illustré par la figure 3.8 en tant que solution N°4 que l'on peut considérée comme un minimum global car elle est au niveau d'énergie le plus bas. Il apparaît donc sur ce cas à plusieurs vortex que Ipopt permet de converger vers des états méta-stable différents si les critères de convergence ne sont pas trop contraignants et si les maillages ne sont pas trop fins. Les erreurs numériques dues à un maillage trop peu raffiné peuvent faire basculer la convergence vers une autre branche de solutions. Cependant, si le maillage est fin et le critère de convergence faible, Ipopt cible systématiquement l'état de plus faible énergie.

Conclusion L'exemple avec un potentiel harmonique montre que la méthode d'optimisation utilisant la bibliothèque Ipopt et l'adaptation de maillage permettent d'atteindre rapidement et précisément l'état fondamental ou des états méta-stables proches de la condition initiale. Cependant, le deuxième exemple avec un potentiel quartique+quadratique indique que l'erreur de convergence demandée et la précision dans l'adaptation de maillage doivent être gérées avec prudence. En effet, si l'on cible un état méta-stable, une modification de ces paramètres peut mener Ipopt sur une autre branche de solution. Il converge alors vers un autre état méta-stable. Cependant, si le maillage est suffisamment fin, Ipopt converge vers l'état de plus faible énergie.

3.4. GPFEM, une toolbox d'éléments finis pour la minimisation de l'énergie de Gross-Pitaevskii avec rotation

3.4.1. Description des programmes

La méthode de gradient de Sobolev ainsi que la méthode utilisant Ipopt décrites précédemment ont été implémentées dans une toolbox 2D et une toolbox 3D basées sur le logiciel FreeFem++ (Hecht et al., 2007) : GPFEM. Grâce à l'utilisation de deux fichiers d'entrée de paramètres, la toolbox offre à l'utilisateur la possibilité de choisir entre deux adimensionnements (classique ou d'Aftalion-Rivière), trois manières de construire l'approximation initiale (Thomas-Fermi, axisymétrique ou sans rotation) et deux méthodes pour minimiser l'énergie (gradient de Sobolev ou Ipopt). La principale différence entre les codes 2D et ceux 3D réside dans le post-traitement : on peut compter automatiquement le nombre de vortex en 2D alors que cela est plus difficile en 3D. De plus, les paramètres à entrer en 3D peuvent différer de ceux en 2D : il y a plusieurs paramètres additionnels en 3D contrôlant la forme du modèle de vortex (forme de I, de S, ou de U) et la forme du maillage initial (cylindrique ou ellipsoïdal). On explique dans l'annexe B comment construire un maillage ellipsoïdal avec FreeFem++. De plus, l'utilisateur peut choisir de tracer avec **Gnuplot** (Williams and Kelley, 2015) l'évolution de l'énergie pendant que l'algorithme tourne, ainsi que la solution approchée à certaines itérations, en utilisant soit l'outil de visualisation interne de FreeFem++, soit le logiciel **Medit** (Frey, 2001a). Dans l'annexe C nous décrivons le programme informatique et l'organisation des fichiers. Puis nous nous concentrons sur la liste des paramètres d'entrée et la structure des fichiers de sortie.

Architecture du programme informatique

La figure 3.9 donne un aperçu du contenu de la toolbox 3D. La toolbox 2D a une architecture similaire.

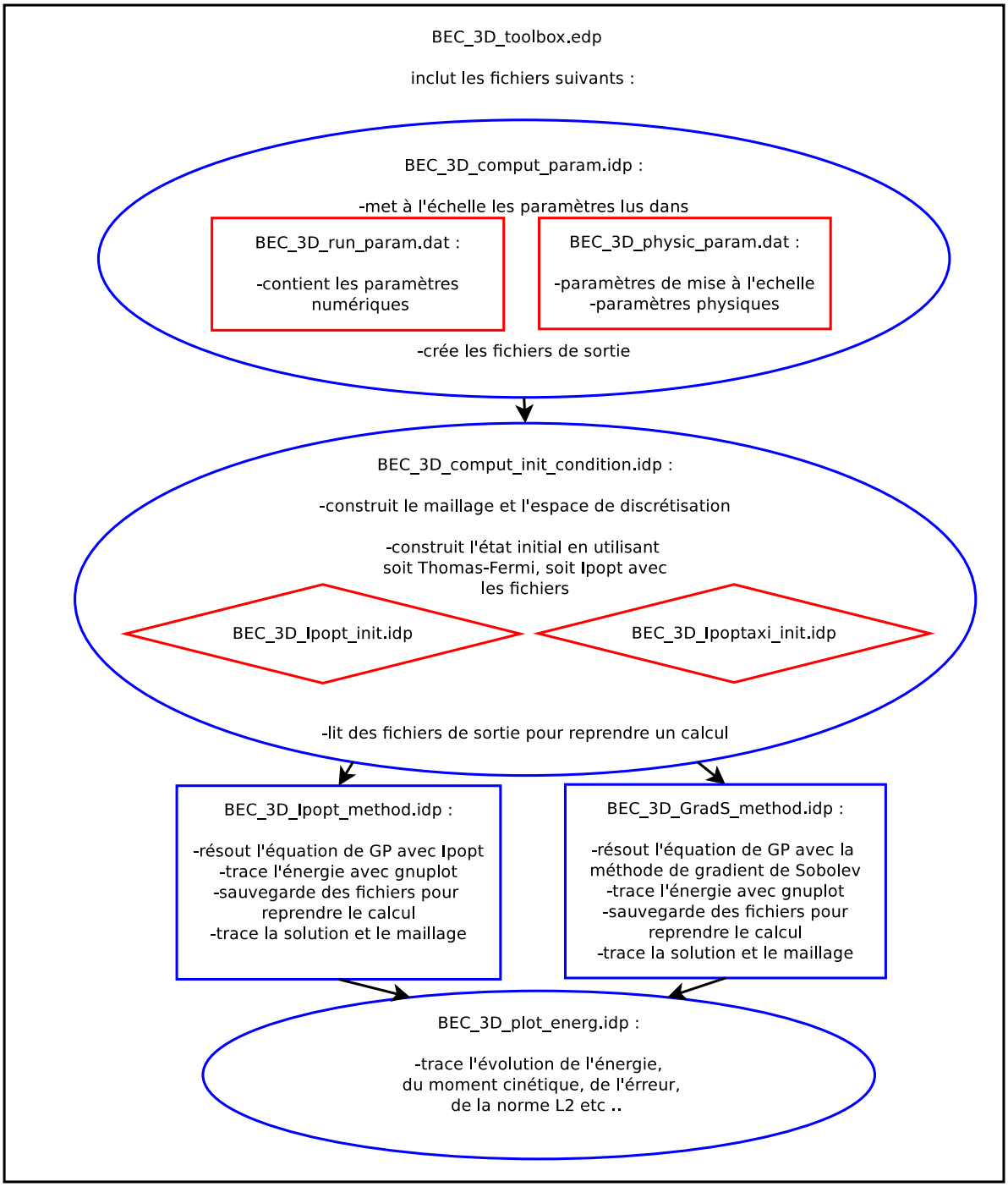


FIGURE 3.9.: Architecture du programme informatique de la toolbox 3D.

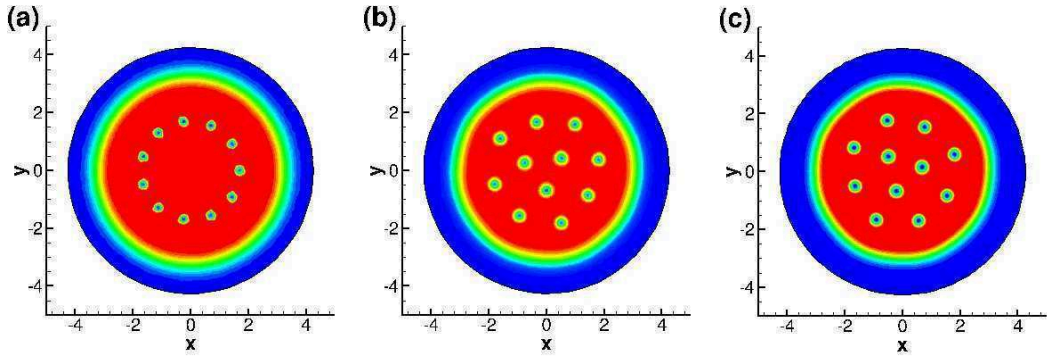


FIGURE 3.10.: Solution du deuxième exemple en 2D : (a) l'état initial construit en ajoutant 11 modèles de vortex dans l'état fondamental construit avec Ipopt (1D axisymétrique), (b) solution convergée avec le gradient de Sobolev, (c) solution obtenue avec Ipopt. Adimensionnement d'Aftalion-Rivière avec $\varepsilon = 0.03$

3.4.2. Résultats obtenus en 2D et en 3D et interface utilisateur

Pour simplifier la compréhension des fichiers de paramètres, certains exemples ont été fournis dans le dossier *Examples*. Une interface utilisateur a été implémentée en utilisant la bibliothèque **GLUT** (Kilgard, 2000) pour lancer ces exemples ou exécuter la toolbox avec des fichiers de paramètres prédéfinis. Dans cette partie, nous présentons d'abord les exemples puis nous nous concentrons sur la description de l'interface utilisateur.

Calculs en 2D

Les exemples en 2D sont construits en utilisant deux formes du potentiel. Pour chaque cas, l'utilisation des deux adimensionnements et des deux méthodes numériques est possible. Rappelons qu'avec notre adimensionnement $C_g = \sqrt{\varepsilon}\beta$ (voir (2.3.5))

1. Le premier cas est le potentiel harmonique avec les paramètres $a_x = 1$, $a_y = 1$ (voir 2.3.16), $\beta = 500$ (voir éq. 2.3.5) et $\Omega/\omega_\perp = 0.4$ (voir éq. 2.3.6). Nous commençons la simulation avec une approximation initiale fabriquée avec Ipopt, à laquelle un vortex décentré est ajouté (comme dans la figure 3.5(a)). L'état final atteint est un condensat contenant un vortex central comme dans la figure 3.5(b). Pour lancer cet exemple, les fichiers suivants du dossier *Examples* doivent être utilisés :
   - *AR_Harm_physic_param.dat* ou *Classical_Harm_physic_param.dat* pour les paramètres physiques, selon l'adimensionnement que l'on souhaite choisir,
   - *Ipopt_Harm_run_param.dat* ou *GradS_Harm_run_param.dat* pour les paramètres numériques, selon la méthode choisie.
2. Le second cas est un potentiel combiné, quartique et quadratique, avec les paramètres $a_x = 1$, $a_y = 1$, $a_4 = 0.5$ (voir eq. 2.3.16), $\beta = 500$ et $\Omega/\omega_\perp = 2$. La simulation est initiée par une approximation calculée avec Ipopt dans le cas axisymétrique, à laquelle a été ajouté un cercle de onze modèles de vortex, comme le montre la figure 3.10(a). Les deux méthodes de calcul donnent un condensat présentant onze vortex arrangés en un réseau d'Abrikosov, comme présenté dans les figures 3.10(b) et 3.10(c). Pour lancer cet exemple, les fichiers suivants doivent être utilisés dans le dossier *Examples* :

- *AR_ Quart_ physic_ param.dat* ou *Classical_ Quart_ physic_ param.dat* pour les paramètres physiques,
- *Ipopt_ Quart_ run_ param.dat* ou *GradS_ Quart_ run_ param.dat* pour les paramètres numériques.

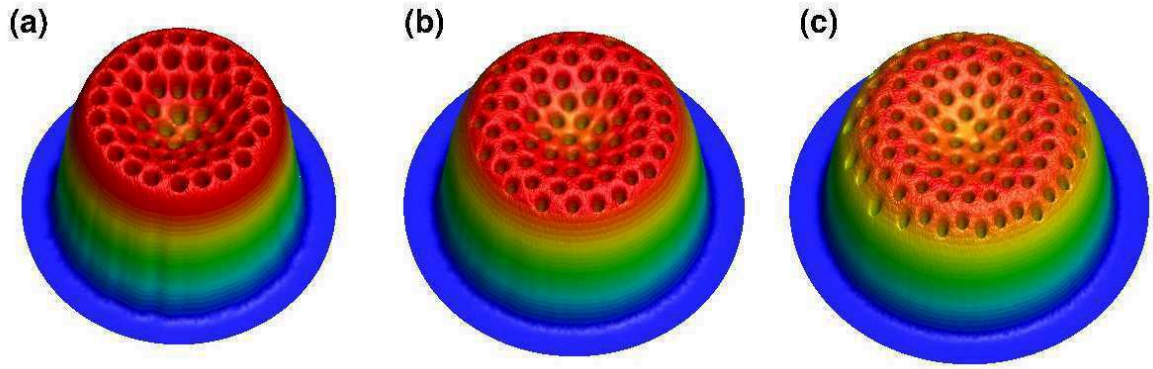


FIGURE 3.11.: Solution 2D obtenue avec la méthode de gradient de Sobolev pour un potentiel quartique+quadratique avec $\Omega/\omega_\perp = 3.5$ et différentes valeurs pour la constante d'interaction non-linéaire $(a)\,\beta = 5000$, $(b)\,\beta = 10\,000$, $(c)\,\beta = 15\,000$. Adimensionnement d'Aftalion-Rivière avec $(a)\,\varepsilon = 0.01$, $(b)\,\varepsilon = 0.007$, $(c)\,\varepsilon = 0.0058$.

Dans les figures 3.11 et 3.12, nous montrons deux résultats obtenus avec le même potentiel quartique+quadratique que l'exemple en 2D présenté dans la figure 3.10 : $a_x = 1$, $a_y = 1$, $a_4 = 0.5$. Pour le cas de la figure 3.11, on a donné à la vitesse de rotation la valeur $\Omega = 3.5$ et fait croître la constante non linéaire β de 5000 à 15000. Quand cette constante croît, le condensat devient de plus en plus étendu et le nombre de vortex augmente significativement. Ces derniers s'organisent en un réseau triangulaire d'Abrikosov. Les fichiers utilisés pour cette simulation sont fournis dans le dossier *Input* sous les noms *BEC_ 2D_ physic_ param_ Latt.dat* et *BEC_ 2D_ run_ param_ Latt.dat*.

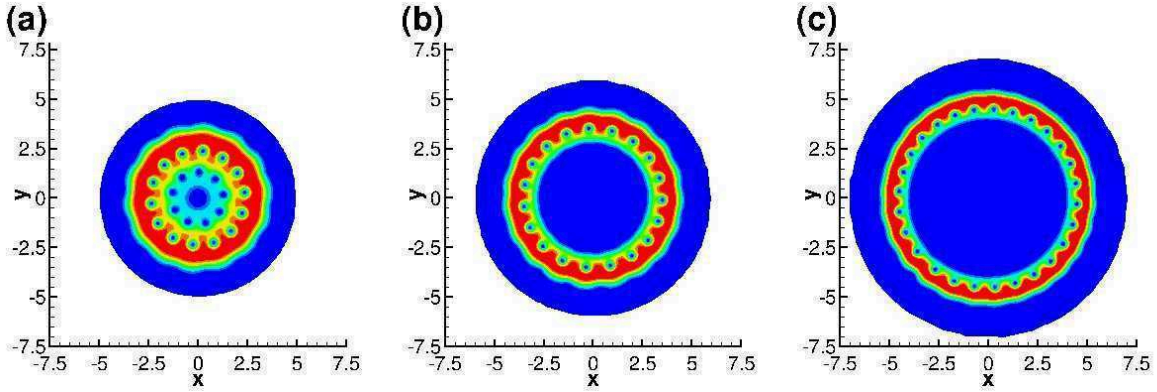


FIGURE 3.12.: Solution 2D calculée avec la méthode utilisant Ipopt pour un potentiel quartique+quadratique et $\beta = 500$. Différentes fréquences de rotation sont considérées : $(a)\,\Omega/\omega_\perp = 3$, $(b)\,\Omega/\omega_\perp = 4$, $(c)\,\Omega/\omega_\perp = 5$. Adimensionnement d'Aftalion-Rivière avec $\varepsilon = 0.032$.

Dans le cas de la figure 3.12, la constante non linéaire est fixée à $\beta = 500$ alors que la vitesse de rotation Ω croît de 3 à 5. Le condensat s'étend au fur et à mesure que la vitesse de rotation augmente et un vortex géant apparaît en son centre. Ce cas fut simulé dans Tsubota et al. (2002); Aftalion and Danaila (2004). La taille du domaine de résolution doit être plus grande quand la vitesse de rotation est plus importante. Cela illustre la nécessité d'utiliser l'approximation de Thomas-Fermi pour estimer la taille du condensat. Les fichiers utilisés pour réaliser cette simulation sont fournis dans le dossier *Input* sous les noms *BEC_2D_physic_param_Giant.dat* et *BEC_2D_run_param_Giant.dat*.

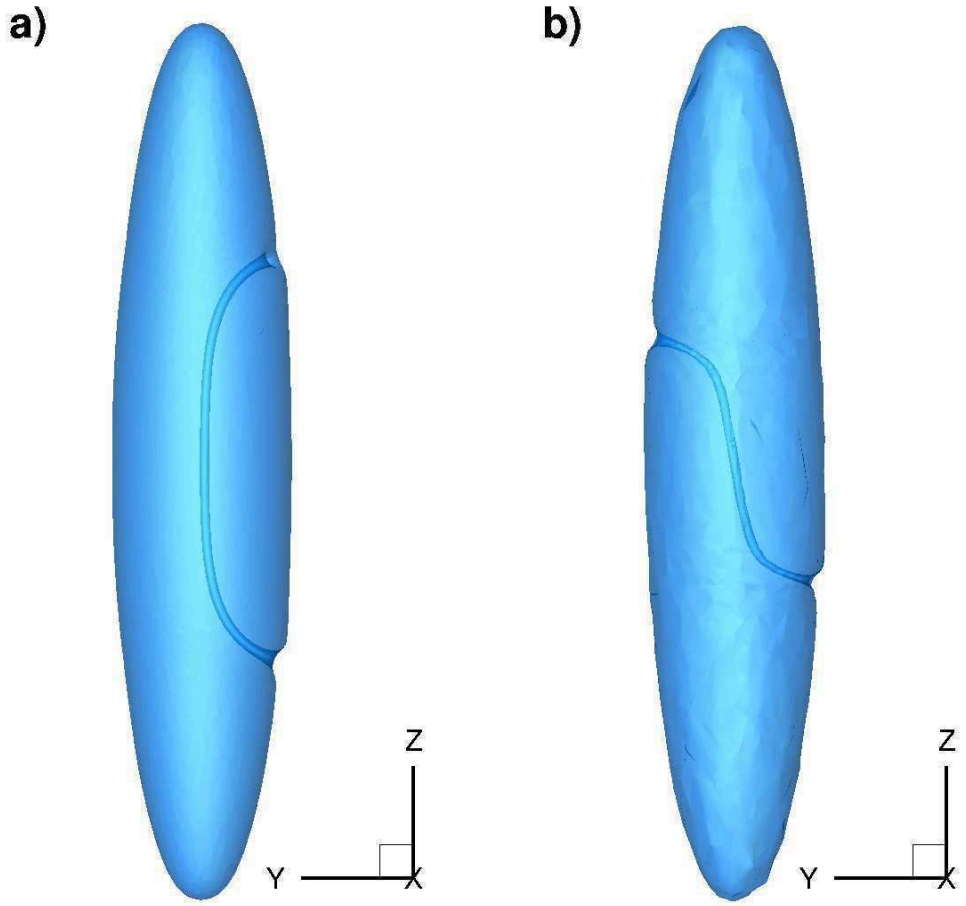


FIGURE 3.13.: Exemple que l'on peut lancer depuis l'interface utilisateur : isosurface de faible densité $\rho = |u|^2$, illustrant un vortex en 3D. (a) Vortex en forme de U obtenu avec Ipopt en partant d'un état initial construit avec un modèle de vortex central, en forme de U. (b) Vortex en forme de S obtenu avec la méthode de gradient de Sobolev en partant d'un état initial construit avec un modèle de vortex central, en forme de S. Adimensionnement d'Aftalion-Rivière avec $\varepsilon = 0.044$.

Calculs en 3D

Nous décrivons maintenant les deux exemples de simulation fournis en trois dimensions. Ils correspondent au cas d'un potentiel de piégeage harmonique dont les paramètres sont $a_x = 1$, $a_y = 1.06^2$, $a_z = 0.067^2$ (voir éq. 2.3.16). La constante non linéaire est fixée à $\beta = 15900$ et

la vitesse de rotation à $\Omega/\omega_\perp = 0.4$. Cela correspond à des simulations réalisés dans Aftalion and Danaila (2003). Ces tests numériques ont montré qu'avec les mêmes paramètres physiques, on peut construire différents états stationnaires. En effet, en partant d'états initiaux distincts, on atteint des états méta-stables différents. Dans le premier cas, illustré par la figure 3.13(a), la simulation a commencé avec une approximation axisymétrique dans laquelle un vortex en forme de U a été implanté. L'état final atteint, à la fois avec la méthode de gradient de Sobolev et Ipopt, présente un vortex courbé, en forme de U. Dans le second cas présenté dans la figure 3.13(b), nous commençons avec une approximation axisymétrique construite avec un vortex central en forme de S. L'état final convergé conserve ce vortex en forme de S avec les deux méthodes de résolution. Selon Aftalion and Danaila (2003) le vortex en forme de S est bien un autre minimum local de l'énergie. Nous en concluons que les deux méthodes convergent vers le minimum local qui est le plus proche de l'approximation initiale considérée. Les fichiers d'entrée contenant les paramètres de cet exemple sont fournis dans le dossier *Examples* :

- *VortexU_physic_param.dat* et *VortexS_physic_param.dat* pour les paramètres physiques,
- *VortexU_GradS_run_param.dat* et *VortexU_Ipopt_run_param.dat* pour les paramètres numériques du cas du vortex en forme de U,
- *VortexS_GradS_run_param.dat* et *VortexS_Ipopt_run_param.dat* pour le vortex en forme de S.

Le résultat montré dans la figure 3.14 a été obtenu en utilisant les paramètres de Aftalion and Danaila (2004) : $a_x = -0.2$, $a_y = -0.2$, $a_z = 0.067^2$, $a_4 = 0.075$, $\beta = 21\,000$ (voir 2.3.16), et $\Omega/\omega_\perp = 2$. L'état fondamental possède un vortex géant entouré par onze vortex simples. Cette simulation a été réalisée avec Ipopt pour un potentiel de piégeage quartique-moins-quadratique. Les fichiers utilisés sont fournis dans le dossier *Input* : *BEC_3D_physic_param_Giant.dat* et *BEC_3D_run_param_Ipopt_Giant.dat.*

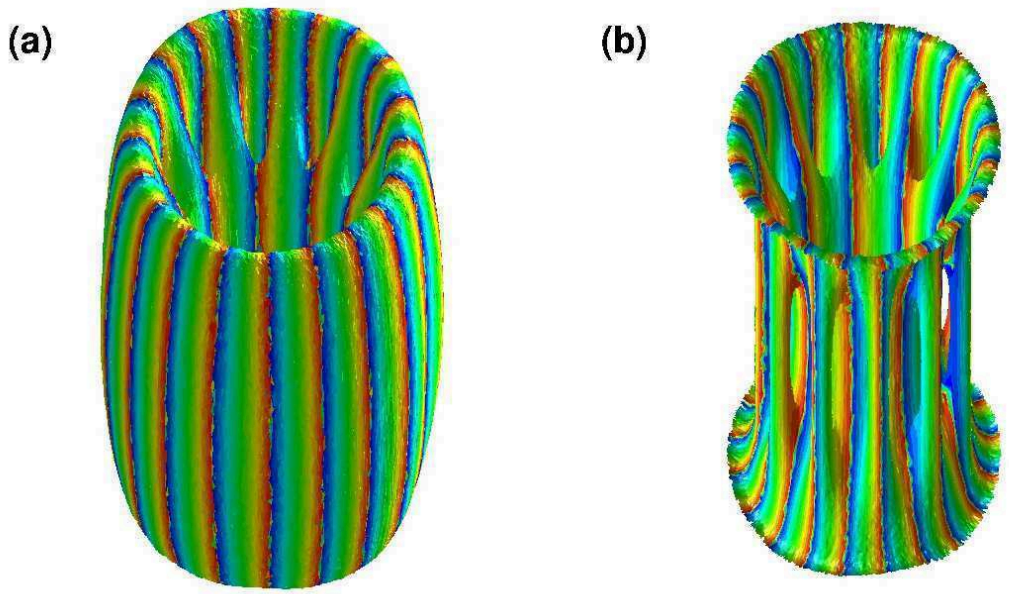


FIGURE 3.14.: Solution 3D construite avec Ipopt pour un potentiel de piégeage quartique-moins-quadratique, $\beta = 21\,000$ et $\Omega/\omega_\perp = 2$. (a) Isosurface de faible densité atomique colorée avec la phase. (b) L'enveloppe externe est enlevée pour visualiser les vortex simples à l'intérieur du condensat. Adimensionnement d'Aftalion-Rivière avec $\varepsilon = 0.014$.

La figure 3.15 illustre une autre possibilité d'état fondamental avec vortex. On utilise un potentiel harmonique anisotrope avec $a_x = 1$, $a_y = 1.06^2$, $a_z = 0.067^2$, $\beta = 50\,000$ (voir 2.3.16), et $\Omega/\omega_\perp = 0.95$. Le résultat de la simulation permet la visualisation en 3D d'un condensat présentant 31 vortex. L'anisotropie du potentiel de piégeage rend le condensat plus allongé le long de l'axe des x. Les fichiers utilisés pour cette simulation sont fournis dans le dossier *Input* : *BEC_3D_physic_param_aniso.dat* et *BEC_3D_run_param_Ipopt_aniso.dat*.

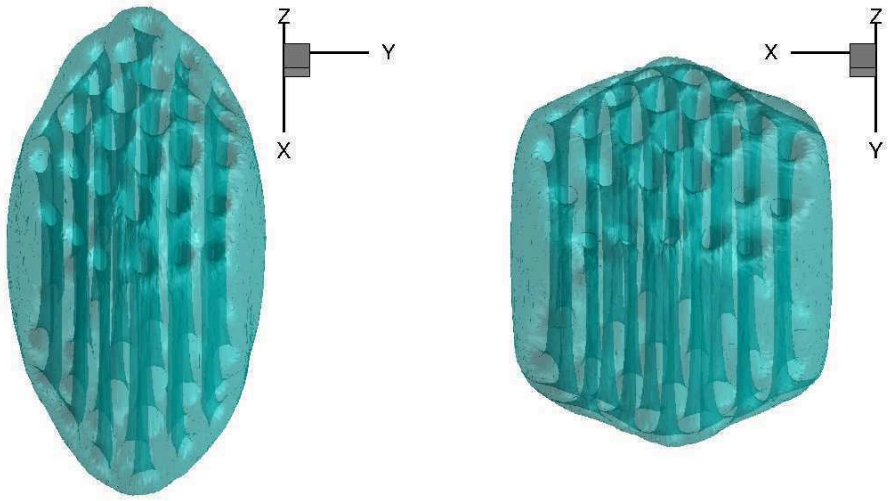


FIGURE 3.15.: Solution 3D construite avec la méthode de gradient de Sobolev pour un potentiel de piégeage harmonique anisotrope, $\beta = 50\,000$ et $\Omega/\omega_\perp = 0.95$. Différents point de vue de la même isosurface de faible densité atomique montrant la présence de 31 vortex dans un condensat plus étiré le long de l'axe des x. Adimensionnement d'Aftalion-Rivière avec $\varepsilon = 0.01$.

Interface utilisateur

Une interface utilisateur a été réalisée en s'appuyant sur l'outil GLUT de la bibliothèque OpenGl (Kilgard, 2000). Le code source de cette interface se trouve dans le dossier GLUT. Il peut être compilé en utilisant le fichier "makefile" fourni avec la toolbox. Cette interface permet à l'utilisateur de lancer facilement des simulations en utilisant, soit les fichiers d'exemple du dossier *Examples*, soit les fichiers d'entrée présents dans le dossier *Input*. Une capture d'écran de l'interface de la toolbox 3D est présentée dans la figure 3.16. En haut à gauche on peut voir une fenêtre terminal depuis lequel l'exécutable "RunToolbox" a été lancé. La fenêtre en haut à droite de la figure apparaît alors. En cliquant sur le bouton droit de la souris, un menu déroulant permet à l'utilisateur de lancer la toolbox avec l'un des exemples prédéfinis, ou en utilisant les fichiers d'entrée fournis dans le dossier *Input*. Ensuite, la fenêtre Gnuplot dans le coin inférieur droit de la figure 3.16 apparaît et permet de visualiser l'évolution de l'énergie durant la simulation. Enfin, on peut voir dans le coin inférieur gauche la solution 3D tracée avec Medit. L'utilisateur peut aussi tracer cette solution avec l'outil graphique usuel de FreeFem++.

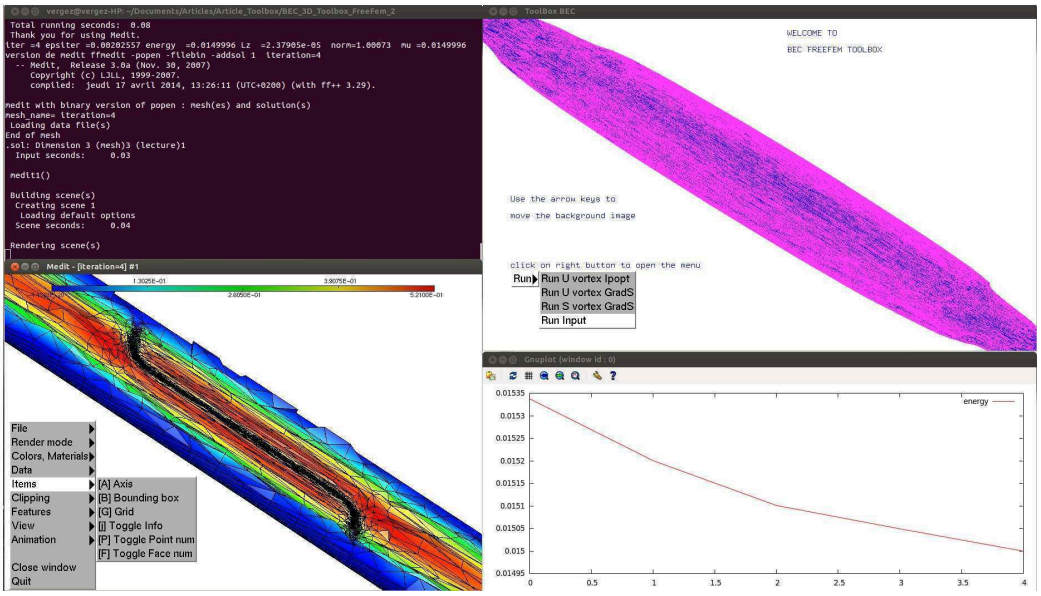


FIGURE 3.16.: Capture d'écran de l'interface utilisateur pour les simulations en 3D. On peut voir : la fenêtre terminal dans lequel l'application est lancée, la solution tracée avec Medit et le tracé de l'évolution de l'énergie pendant le calcul.

En 2D, il y a trois menus pour choisir l'un des exemples décris précédemment :

1. *Potential* permet de choisir entre un exemple de potentiel harmonique (*Harm*) ou quartique+quadratique (*Quart*).
2. *Method* permet de choisir entre la méthode utilisant Ipopt (*Ipopt*) ou celle du gradient de Sobolev (*GradS*).
3. *Scaling* permet de choisir entre l'adimensionnement d'Aftalion-Rivière (*AR*) ou celui classique.

Dans le dernier menu (*Run*), l'utilisateur peut, soit lancer l'exemple choisi en cliquant sur (*Run Example*) ou lancer la toolbox sur les fichiers d'entrée du dossier *Input* en cliquant sur (*Run Input*).

3.5. Conclusion

- En nous basant sur une méthode aux éléments finis et en utilisant le logiciel FreeFem++, nous avons développé deux méthodes pour la minimisation de l'énergie de Gross-Pitaevskii :
  1. La première, la méthode de gradient de Sobolev présentée dans Danaila and Kazemi (2010) est une méthode de descente très stable qui converge vers un minimum local proche de l'état initial. Elle avait déjà été étudiée pour des configurations 2D dans Danaila and Hecht (2010). Nous l'avons améliorée en y ajoutant une recherche optimale du pas de descente et en l'utilisant pour des configurations 3D.
  2. La deuxième est une méthode utilisant la librairie d'optimisation Ipopt. Cette librairie utilise une méthode de points intérieures (Wächter, 2002), une méthode de barrière (J. Nocedal and Waltz, 2008) et un filtre de recherche linéaire (Wächter and Biegler, 2006). Nous l'avons utilisée pour étudier des configurations en 2D et en 3D. Elle converge vers des minima locaux proches de l'état initial mais peux sauter sur d'autres branches de solution et converger vers un autre minimum local selon la finesse du maillage. Cependant, elle est très efficace pour cibler le minimum global.
- La méthode d'adaptation de maillage présentée pour des configurations 2D dans (Danaila and Hecht, 2010) a été étendue pour des cas 3D en utilisant les logiciels **mshmet** (C. Dapogny and Frey, 2014) et **mmg3d** (Dobrzynski and Frey, 2012). L'adaptation de maillage est un outil primordial, utilisable pour des méthodes aux éléments finis, permettant d'effectuer des simulations précises et de réduire le temps de calcul.

- Ces méthodes et ces outils, après avoir été validés, ont été rassemblés dans une toolbox. Cette dernière permet de lancer des simulations avec aisance grâce à des fichiers de paramètres et en utilisant une interface réalisée à l'aide de la librairie **GLUT** (Kilgard, 2000). Elle peut être rapidement adaptée à d'autres modèles mathématiques et une simple instruction permet de passer d'éléments finis P_1 à des éléments finis P_2 ou d'ordre plus élevé (P_3 ou P_4). Ce logiciel a été diffusé et a fait l'objet d'un article publié dans Computer Physics Communication en 2016 (Vergez et al., 2016).

4. Résolution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii dépendant du temps

Rappelons l'équation adimensionnée (2.3.3) de Gross-Pitaevskii dépendant du temps (Pitaevskii and Stringari, 2003; Gross, 1961; Pitaevskii, 1961), utilisée pour simuler l'évolution en temps réel du condensat de Bose-Einstein en rotation (Aftalion, 2006; Barenghi et al., 2001) :

$$iC_t \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta u + C_{\text{trap}} u + C_g |u|^2 u - iC_\Omega (\mathbf{A}^t \nabla) u.$$

Le potentiel de piégeage C_{trap} peut dépendre du temps comme dans (Bao and Cai, 2013a; Sulem and Sulem, 1999; Bao, 2007; Pitaevskii and Stringari, 2003), ce qui rajoute une difficulté supplémentaire. Cette équation dispersive possède plusieurs propriétés (Sulem and Sulem, 1999; Bao and Cai, 2013a; Cazenave, 2003) qu'il est intéressant de pouvoir reproduire lors du passage en discret :

1. Réversibilité en temps : l'équation est invariante par changement de variable $t \to -t$ et la conjugaison complexe.
2. Invariance par changement de jauge : un changement de potentiel $C_{\text{trap}} \to C_{\text{trap}} + a$ où a est une constante réelle entraîne un changement de la fonction d'onde $u(t, \mathbf{x}) \to u(t, \mathbf{x}) e^{-iat/C_t}$. Ce qui implique directement une conservation de la densité $\rho = |u|^2$.
3. Conservation du nombre d'atomes :
$$\int_{\mathbb{R}^d} |u(t, \mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1, \quad \forall t \geq 0.$$
4. Conservation de l'énergie totale dans le cas où le potentiel de piégeage ne dépend pas du temps :
$$E(t) := \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2}|\nabla u|^2 + C_{\text{trap}} |u|^2 + \frac{1}{2} C_g |u|^4 - iC_\Omega \, u^* \mathbf{A}^t \nabla u \right] d\mathbf{x} = E(0), \forall t \geq 0.$$
5. Conservation du moment angulaire dans le cas où le potentiel de piégeage est isotrope et ne dépend pas du temps :
$$L_z(t) = \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \left[-iC_\Omega \, u^* \mathbf{A}^t \nabla u \right] d\mathbf{x} = L_z(0), \forall t \geq 0.$$

Dans l'approche numérique de la solution, il est primordial de construire des schémas qui respectent toutes ou une partie de ces propriétés. De nombreux schémas numériques existent dont on peut trouver un récapitulatif dans Bao and Cai (2013a) ou Antoine et al. (2013). Parmi ces schémas, citons par exemple le schéma de Crank-Nicolson dont on peut trouver des études pour une discrétisation spatiale en différences finies dans Guo (1986); Bao and Cai (2012, 2013b); Chang et al. (1999, 1995); Glassey (1992). Il est d'ordre deux en temps et en espace, inconditionnellement stable et vérifie au niveau discret les propriétés de réversibilité en temps, d'invariance par changement de jauge et de conservation de la masse et de l'énergie.

Cependant il fait intervenir une résolution à chaque pas de temps d'un système non-linéaire et est donc extrêmement coûteux en temps de calcul.

Il est donc préférable de trouver des schémas qui ne font intervenir que la résolution moins coûteuse d'un système linéaire à chaque pas de temps. Toujours dans le cadre d'une discrétisation spatiale en différences finies, c'est le cas d'un schéma en temps semi-implicite proposé dans (Bao and Cai, 2013a, 2012, 2013b), où la discrétisation du terme non linéaire fait intervenir un schéma de leap-frog. Ce schéma est aussi d'ordre deux en temps et en espace et vérifie la réversibilité en temps mais aucune des autres propriétés de l'équation de Gross-Pitaevskii citées ci-dessus. De plus, il est stable sous condition.

Un schéma de relaxation, que nous étudierons plus précisément dans ce chapitre dans la section 4.2, a été proposé dans Besse (2004) pour une discrétisation spatiale en différences finies et ne fait intervenir que la résolution d'un système linéaire à chaque pas de temps. Il est inconditionnellement stable, d'ordre deux en temps et en espace, vérifie la propriété de réversibilité en temps ainsi que la conservation de la masse et de l'énergie.

Le principe de splitting en temps consistant à résoudre successivement la partie linéaire, puis la partie non-linéaire de l'équation est très utilisé, par exemple dans Huang et al. (2007, 2008); Caliari et al. (2009); Taha and Ablowitz (1984); Pathria and l. Morris (1990); Weideman and Herbst (1986); Hardin and Tappert (1973). Nous l'étudions plus précisément dans la section 4.1 de ce chapitre. Ce type de schéma est très bien adapté pour une discrétisation spectrale en espace que l'on retrouve dans Bao et al. (2003a, 2002, 2003b); Besse et al. (2002); Lubich (2008); Gauckler and Lubich (2010); Neuhauser and Thalhammer (2009); Shen and Wang (2013) et est d'ordre un en temps pour un splitting simple et d'ordre deux pour un splitting de Strang (Strang, 1968). Mais des ordres plus élevés ont été atteints dans Bao and Shen (2005); Bao and Zhang (2005); Thalhammer (2008, 2012); Chin and Chen (2001a,b), jusqu'à l'ordre quatre. Ce type de schéma est inconditionnellement stable, et respecte le principe de réversibilité en temps de l'équation, d'invariance par changement de jauge et de conservation de la masse mais il ne permet pas la conservation de l'énergie. Des discrétisations en différences finies ont aussi été étudiées pour les schémas de splitting dans (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005). Les schémas obtenues sont d'ordre deux en temps et en espace et respectent les mêmes propriétés de conservation et d'invariance de l'équation que les schémas de splitting spectraux en espace.

Il existe des méthodes adaptées spécifiquement au cas de la présence du terme de rotation dans l'équation de Gross-Pitaevskii, tel que dans Bao and Cai (2013a,b); Bao and Wang (2006); Bao et al. (2006b, 2009, 2013a); Caradoc-Davies et al. (1999); Saito and Ueda (2001). Une astuce consiste notamment à effectuer un changement de repère via des coordonnées lagrangiennes en rotation (García-Ripoll et al., 2001; P.Antonelli et al., 2012; Bao et al., 2013a). Le terme de rotation disparait mais le potentiel de piégeage modifié dépend maintenant du temps. Cependant, les méthodes de relaxation, de splitting en temps, de Crank-Nicolson ou de différences finies semi-implicites sont aussi adaptées à l'équation avec rotation.

Il existe bien d'autres schémas permettant la résolution en temps de l'équation de Gross-Pitaevskii, qui font souvent intervenir des différences finies pour la discrétisation en espace, comme un schéma de différences finies d'ordre deux que l'on trouve dans Durán and Sanz-Serna (2000); Robinson et al. (1993); Sanz-Serna (1984, 1986), bien adapté pour l'étude de la propagation de singletons ou un schéma de leap-frog dans Zhang and Bao (2007); Muruganandam and Adhikari (2009). Il existe aussi un schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 que l'on retrouve dans Adhikari (2000); Baer (2000); Caradoc-Davies et al. (1999, 2000), mais ce dernier ne respecte pas la réversibilité en temps de l'équation. Des discrétisations en espace utilisant

des schémas compacts d'ordre 4 se trouvent aussi dans Wang (2011); Liao et al. (2010); Xie et al. (2009) mais on trouve très peu d'exemples de discrétisation spatiale de type éléments finis. Citons par exemple Akrivis et al. (1991), où une méthode de Galerkin en espace combinée à un schéma de Crank-Nicolson en temps sont utilisés et Akrivis and Dougalis (1991) pour une méthode de Runge-Kutta en temps et des éléments finis en deux dimensions d'espace.

Dans ce chapitre nous reprenons des schémas de time-splitting (section 4.1) et de relaxation (section 4.2). Nous vérifions le bon comportement des schémas et leur ordre de convergence en temps sur des exemples connus. Puis, nous les comparons avec les schémas utilisant une discrétisation spatiale spectrale. Nous montrons qu'en utilisant des éléments finis P_2 pour la discrétisation en espace, nous pouvons obtenir des résolutions comparables aux schémas spectraux en 2D. Nous étendons ensuite ces méthodes à des simulations en trois dimensions d'espace.

4.1. Schémas en temps de type splitting

Nous rappelons tout d'abord dans cette section le principe général du splitting puis nous énonçons le schéma de splitting de Lie-Trotter ainsi que celui de Strang adaptés à la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii.

Le principe général du splitting :
Considérons deux opérateurs auto-adjoints A et B de domaines $\mathcal{D}(\mathrm{A}) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ et $\mathcal{D}(\mathrm{B}) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$. Supposons de plus que $A+B$ est aussi un opérateur auto-adjoint de domaine $\mathcal{D}(\mathrm{A}) \cap \mathcal{D}(\mathrm{B}) \subset L^2(\mathbb{R}^d)$.
Soit alors le problème d'évolution

$$\begin{cases} i\partial_t u(t,\mathbf{x}) = \mathrm{A}u(t,\mathbf{x}) + \mathrm{B}u(t,\mathbf{x}), \ \forall t \in \mathbb{R}^+, \ \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \\ u(0,\mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^d). \end{cases} \tag{4.1.1}$$

Soit la solution de (4.1.1), $u(t,\mathbf{x}) = e^{-i(\mathrm{A}+\mathrm{B})t}u_0(\mathbf{x})$ pour $t \in \mathbb{R}^+$ et $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. Le principe de splitting consiste alors à approcher l'opérateur $e^{-i(\mathrm{A}+\mathrm{B})t}$ par une combinaison des opérateurs $e^{-i\mathrm{A}t}$ et $e^{-i\mathrm{B}t}$ à des temps fractionnaires :

$$u(t+\delta t,\mathbf{x}) = e^{-i(\mathrm{A}+\mathrm{B})\delta t}u_0(\mathbf{x}) \simeq e^{-ia_1\mathrm{A}\delta t}e^{-ib_1\mathrm{B}\delta t}e^{-ia_2\mathrm{A}\delta t}e^{-ib_2\mathrm{B}\delta t}...e^{-ia_p\mathrm{A}\delta t}e^{-ib_p\mathrm{B}\delta t}u_0(\mathbf{x}),$$

où $(a_k,b_k)_{1\leq k\leq p}$ sont des poids qui sont choisis et $\delta t << 1$ est une variation de temps locale. Selon le choix des poids, on peut atteindre différents ordres de convergence. Ainsi le schéma de Lie-Trotter de poids non-nuls $a_1 = b_1 = 1$ est un schéma d'ordre 1 et le schéma de Strang de poids non-nuls $a_1 = a_2 = \frac{1}{2}$ et $b_1 = 1$ est un schéma d'ordre 2. Il est possible de monter encore en ordre (Bao and Shen, 2005; Bao and Zhang, 2005; Thalhammer, 2008, 2012; Chin and Chen, 2001a,b) .

4.1.1. Schéma de splitting de Lie-Trotter

Le schéma de splitting de Lie-Trotter consiste à choisir les poids $a_1 = b_1 = 1$ dans (4.1). Ainsi en considérant les opérateurs (Bao et al., 2003a; Bao and Wang, 2006; Antoine and Duboscq, 2015)

$$\mathrm{A} = -\frac{1}{2}\Delta - iC_\Omega(\mathbf{A}^t\nabla)$$

et

$$\mathrm{B} = C_{\text{trap}} + C_g |u(t,\mathbf{x})|^2,$$

nous recherchons une approximation de la solution de l'équation de Gross-Pitaevskii qui s'écrit formellement

$$u(t+\delta t,\mathbf{x}) = e^{-i\mathrm{A}\delta t} e^{-i\mathrm{B}\delta t} u(t,\mathbf{x}), \quad \text{pour}\, t \in \mathbb{R}^+ \,\text{et}\, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d.$$

En pratique cela revient à résoudre successivement deux équations.
Soit $(t_n)_{n\in\mathbb{N}} \in [0,t]$ où $t \in \mathbb{R}^+$ et telle que $t_{n+1} = t_n + \delta t$.
À chaque temps t_{n+1}, pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, nous construisons $u_{n+1}(x) = u(t_{n+1},x)$ à partir de $u_n(x)$ en trois étapes :

1) Nous résolvons pour $t \in [t_n, t_{n+1}]$:

$$iC_t \frac{\partial u^{(1)}(t,\mathbf{x})}{\partial t} = -\frac{1}{2}\Delta u^{(1)}(t,\mathbf{x}) - iC_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla u^{(1)}(t,\mathbf{x})), \tag{4.1.2}$$

avec la condition initiale

$$u^{(1)}(t_n,\cdot) = u_n.$$

2) Nous résolvons ensuite pour $t \in [t_n, t_{n+1}]$:

$$iC_t \frac{\partial u^{(2)}(t,\mathbf{x})}{\partial t} = C_{trap}\, u^{(2)}(t,\mathbf{x}) + C_g |u^{(2)}(t,\mathbf{x})|^2 u^{(2)}(t,\mathbf{x}), \tag{4.1.3}$$

avec la condition initiale

$$u^{(2)}(t_n,\cdot) = u^{(1)}(t_{n+1},\cdot).$$

3) Finalement, nous construisons $u_{n+1}(\mathbf{x}) = u^{(2)}(t_{n+1},\mathbf{x})$.

Expliquons plus en détail comment nous procédons à chaque étape de cet algorithme :

– L'équation (4.1.3) admet une solution analytique :

$$u^{(2)}(t,\mathbf{x}) = u^{(1)}(t_{n+1},\mathbf{x})\, e^{-iC_g|u^{(1)}(t_{n+1},\mathbf{x})|^2(t-t_n) - i\int_{t_n}^{t} C_{\text{trap}}(s,\mathbf{x})ds} \tag{4.1.4}$$

Pour calculer le terme $\int_{t_n}^{t} C_{\text{trap}}(s,\mathbf{x})ds$ dans (4.1.4), nous distinguons trois cas :

1. Si $C_{\text{trap}}(t,\mathbf{x})$ ne dépend pas de t nous construisons $C_{\text{trap}} * (t-t_n)$ à chaque pas.
2. Si nous pouvons calculer une primitive en temps $prim(t,\mathbf{x})$ de $C_{\text{trap}}(t,\mathbf{x})$ alors nous construisons à chaque pas $prim(t,\mathbf{x}) - prim(t_n,\mathbf{x})$.
3. Si nous ne connaissons pas de primitive, alors nous construisons une approximation de $\int_{t_n}^{t} C_{\text{trap}}(s,\mathbf{x})ds$ par la méthode de quadrature de Simpson :

$$\int_{t_n}^{t} C_{\text{trap}}(s,\mathbf{x})ds \simeq \frac{(t-t_n)}{6}\left(C_{\text{trap}}(t_n,\mathbf{x}) + 4\, C_{\text{trap}}(\frac{t+t_n}{2},\mathbf{x}) + C_{\text{trap}}(t,\mathbf{x})\right) \tag{4.1.5}$$

– Pour résoudre (4.1.2) à l'étape n, les schémas de time-splitting spectraux que l'on trouve dans (Bao and Zhang, 2005; Antoine and Duboscq, 2015) utilisent le fait que la discrétisation en espace est spectrale, ce qui permet de résoudre un système linéaire à matrice diagonale. Mais, quand la discrétisation en espace est basée sur des différences finies, une méthode de Crank-Nicolson est utilisée (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005). Le schéma de Crank-Nicolson est en effet d'ordre deux en temps

et inconditionnellement stable, respecte la propriété de réversibilité en temps, l'invariance par changement de jauge et la conservation de la masse et de l'énergie pour la résolution de l'équation linéaire (4.1.2). Nous décidons donc d'utiliser une méthode de Crank-Nicolson à cette étape.
Pour tout $x \in \mathbb{R}^d$ nous construisons $u^{(1)} = u^{(1)}(t_{n+1}, x)$ à partir de u_n en résolvant :

$$iC_t \frac{u^{(1)} - u_n}{\delta t} = \left(-\frac{1}{2}\Delta - iC_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla) \right) \frac{u^{(1)} + u_n}{2},$$

qui peut se réécrire en posant $q = \frac{u^{(1)} - u_n}{2}$:

$$\left(\frac{2iC_t}{\delta t} - \mathrm{A} \right) q = \mathrm{A} u_n.$$

L'ordre en temps est limité par le schéma de time-splitting de Lie-Trotter qui est d'ordre un. Il est inconditionnellement stable, respecte la condition de réversibilité en temps, la propriété d'invariance par changement de jauge, la conservation de la masse mais pas la conservation de l'énergie (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005). Ainsi le schéma de time-splitting de Lie-Trotter combiné à la méthode de Crank-Nicolson pour la discrétisation en temps de (4.1.2) est d'ordre un en temps, et respecte toutes les propriétés, mise à part celle de conservation de l'énergie. Nous vérifions numériquement cet ordre de convergence ainsi que les propriétés de conservation dans la section 4.3.

4.1.2. Schéma de splitting de Strang

Le schéma de splitting de Strang est construit en choisissant les poids $a_1 = a_2 = \frac{1}{2}$ et $b_1 = 1$ dans (4.1). De nouveau, en considérant les opérateurs (Bao et al., 2003a; Bao and Wang, 2006; Antoine and Duboscq, 2015)

$$\mathrm{A} = -\frac{1}{2}\Delta - iC_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla)$$

et

$$\mathrm{B} = C_{\text{trap}} + C_g |u(t, \mathbf{x})|^2,$$

l'approximation s'écrit formellement,

$$u(t + \delta t, \mathbf{x}) = e^{-\frac{i}{2}\mathrm{A}\delta t} e^{-i\mathrm{B}\delta t} u(t, \mathbf{x}) e^{-\frac{i}{2}\mathrm{A}\delta t}, \quad \text{pour } t \in \mathbb{R}^+ \text{ et } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d.$$

Ainsi l'algorithme de la méthode s'écrit de la manière suivant.

Soit $(t_n)_{n\in\mathbb{N}} \in [0, t]$ où $t \in \mathbb{R}^+$ et telle que $t_{n+1} = t_n + \delta t$.
À chaque temps t_{n+1}, pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, nous construisons $u_{n+1}(x) = u(t_{n+1}, x)$ à partir de $u_n(x)$ en quatre étapes :

1) Nous résolvons pour $t \in [t_n, t_{n+\frac{1}{2}}]$:

$$iC_t \frac{\partial u^{(1)}(t, x)}{\partial t} = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}\Delta u^{(1)}(t, x) - iC_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla u^{(1)}(t, x)) \right), \tag{4.1.6}$$

où

$$u^{(1)}(t_n, \cdot) = u_n. \tag{4.1.7}$$

2) Ensuite, nous résolvons pour $t \in [t_n, t_{n+1}]$:

$$iC_t \frac{\partial u^{(2)}(t,x)}{\partial t} = C_{trap}\, u^{(2)}(t,x) + C_g |u^{(2)}(t,x)|^2 u^{(2)}(t,x), \tag{4.1.8}$$

avec

$$u^{(2)}(t_n, \cdot) = u^{(1)}(t_{n+\frac{1}{2}}, \cdot). \tag{4.1.9}$$

3) Puis, nous résolvons pour $t \in [t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1}]$:

$$iC_t \frac{\partial u^{(3)}(t,x)}{\partial t} = \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\Delta u^{(3)}(t,x) - iC_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla u^{(3)}(t,x))\right), \tag{4.1.10}$$

avec

$$u^{(3)}(t_n, \cdot) = u^{(2)}(t_{n+1}). \tag{4.1.11}$$

4) Enfin, nous calculons $u_{n+1}(x) = u^{(3)}(t_{n+1}, x)$

Explicitons les étapes de cet algorithme.
Nous connaissons de nouveau la solution explicite de (4.1.8) :

$$u^{(2)}(t,x) = u^{(1)}(t_{n+1}, x)\, e^{-iC_g|u^{(1)}(t_{n+1},x)|^2(t-t_n) - i\int_{t_n}^{t} C_{\text{trap}}(s,x)ds} \tag{4.1.12}$$

Encore une fois, nous utilisons le schéma de Crank-Nicolson pour résoudre les équations linéaires (4.1.6) et (4.1.10). Le schéma de time-splitting de Strang est d'ordre deux en temps, inconditionnellement stable, respecte la condition de réversibilité en temps, la propriété d'invariance par changement de jauge, la conservation de la masse mais pas la conservation de l'énergie (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005). Ainsi le schéma de time-splitting de Strang combiné à la méthode de Crank-Nicolson pour la discrétisation en temps de (4.1.6) et (4.1.10) est d'ordre deux en temps, inconditionnellement stable, respecte la réversibilité en temps, l'invariance par changement de jauge et la conservation de la masse. Cet ordre de convergence ainsi que ces propriétés de conservation sont confirmés numériquement dans la la section 4.3.

4.2. Schéma de relaxation

Le schéma de relaxation est présenté dans (Besse, 2004) et (Antoine et al., 2013) pour une discrétisation spatiale en différences finies et dans (Antoine and Duboscq, 2015) pour une discrétisation spectrale. Il est inconditionnellement stable, d'ordre 2 en temps et préserve la masse et l'énergie. De plus il vérifie la propriété de réversibilité en temps mais pas celle d'invariance par changement de jauge. L'algorithme de ce schéma est le suivant :

Soit $(t_n)_{n\in\mathbb{N}} \in [0,t]$ où $t \in \mathbb{R}^+$ et telle que $t_{n+1} = t_n + \delta t$ et $t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \delta t/2$.
Nous construisons $u_{n+1} = u(t_{n+1}, \mathbf{x})$ à partir de u_n selon la formule suivante

$$iC_t \frac{u_{n+1} - u_n}{\delta t} = \left(-\frac{1}{2}\Delta - iC_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla) + \phi_{n+\frac{1}{2}}\right)\frac{u_{n+1} + u_n}{2} + C_{trap}(\mathbf{x}, t_{n+\frac{1}{2}})\frac{u_{n+1} + u_n}{2}, \tag{4.2.1}$$

où le terme non linéaire est évalué au temps intermédiaire $t_{n+\frac{1}{2}}$ par la formule :

$$\phi_{n+\frac{1}{2}} = 2C_g|u_n|^2 - \phi_{n-\frac{1}{2}}, \quad \phi_{-\frac{1}{2}} = C_g|u_0|^2, \quad \phi_{\frac{1}{2}} = C_g|u_0|^2. \tag{4.2.2}$$

En définissant :

$$q = \frac{u_{n+1} + u_n}{2}, \tag{4.2.3}$$

le schéma peut se réécrire :

$$\left(\frac{2iC_t}{\delta t} + \frac{1}{2}\Delta + iC_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla u) - \phi_{n+\frac{1}{2}} - C_{trap}(\mathbf{x}, t_{n+\frac{1}{2}}) \right) q = \frac{2iC_t}{\delta t} u_n, \tag{4.2.4}$$

ou, après multiplication par $(-i\delta t)$:

$$\left(2C_t - (i\delta t)\frac{1}{2}\Delta + (\delta t)C_\Omega(\mathbf{A}^t \nabla u) + (i\delta t)\phi_{n+\frac{1}{2}} + (i\delta t)C_{trap}(\mathbf{x}, t_{n+\frac{1}{2}}) \right) q = (2C_t)u_n. \tag{4.2.5}$$

La solution est alors calculée de la manière suivante :

$$u_{n+1} = 2q - u_n. \tag{4.2.6}$$

Nous vérifions l'ordre de convergence ainsi que les propriétés de conservation du schéma de relaxation sur des exemples connus dans la section 4.3. De plus, nous comparons les résultats obtenues à ceux issues d'un calcul avec une discrétisation en espace spectrale.

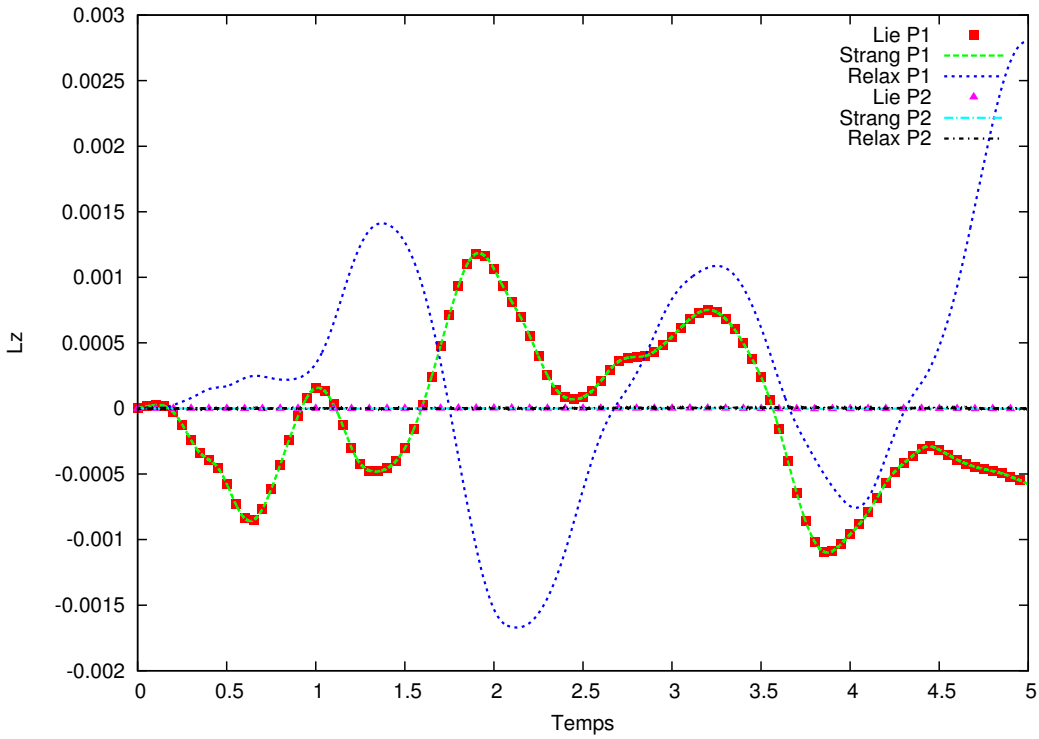


FIGURE 4.1.: Ćas test 1. Évolution au cours du temps du moment cinétique du condensat pour les schémas de Splitting et le schéma de relaxation pour une discrétisation en éléments finis P_1 et P_2.

4.3. Validation des schémas

Afin de vérifier les propriétés et les ordres de convergence des schémas en temps de type splitting et de relaxation, nous les appliquons sur des exemples connus présentés dans les articles Bao and Zhang (2005); Bao et al. (2006b); Antoine and Duboscq (2015).

4.3.1. Cas test 1 : Sans rotation avec un potentiel de piégeage anisotrope

Tout d'abord nous considérons l'exemple numéro 3 de l'article (Bao and Zhang, 2005). Dans ce cas test, nous prenons comme condition initiale l'état fondamental calculé avec Ipopt pour un potentiel de piégeage harmonique de fréquences $a_x = 1$, $a_y = 4$ et une constante de non linéarité $\beta = 20$, sans rotation. A $t = 0$ nous augmentons les fréquences du potentiel de piégeage : $a_x = 4$ et $a_y = 16$. Nous lançons ensuite une simulation de l'évolution en temps jusqu'à $t = 5$.

Comme nous sommes ici dans un cas sans rotation, le moment cinétique doit rester constant, égale à 0. Nous avons donc tracé dans la figure 4.1, l'évolution au cours du temps du moment cinétique pour les trois schéma. Nous observons que pour des éléments finis P_1, le moment cinétique varie autour de zéro avec une amplitude de l'ordre de $5 \cdot 10^{-3}$, ce qui est faible. Le moment cinétique est donc bien conservé et reste nul. De plus, nous observons dans la figure, que le moment cinétique reste plus proche de zéro lorsqu'une discrétisation en éléments finis P_2 est utilisée.

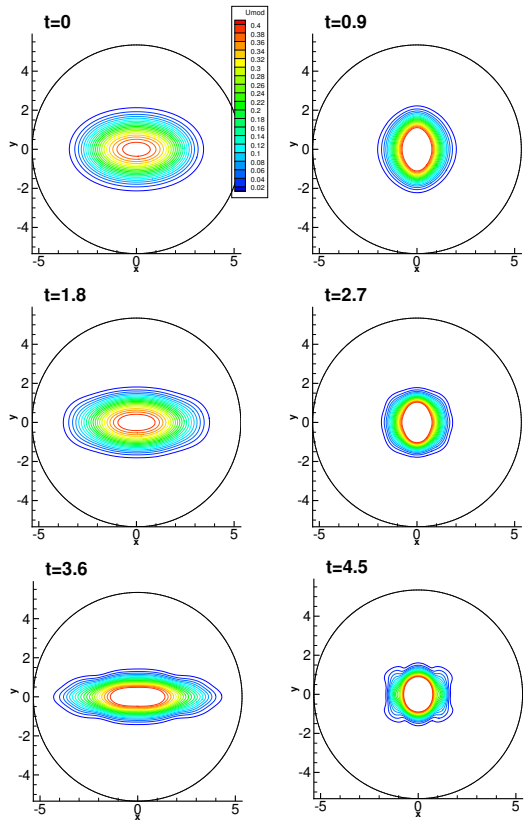


FIGURE 4.2.: Cas test 1. Solution obtenue avec le schéma de relaxation pour une discrétisation en éléments finis P_2 pour un potentiel de piégeage anisotrope sans rotation.

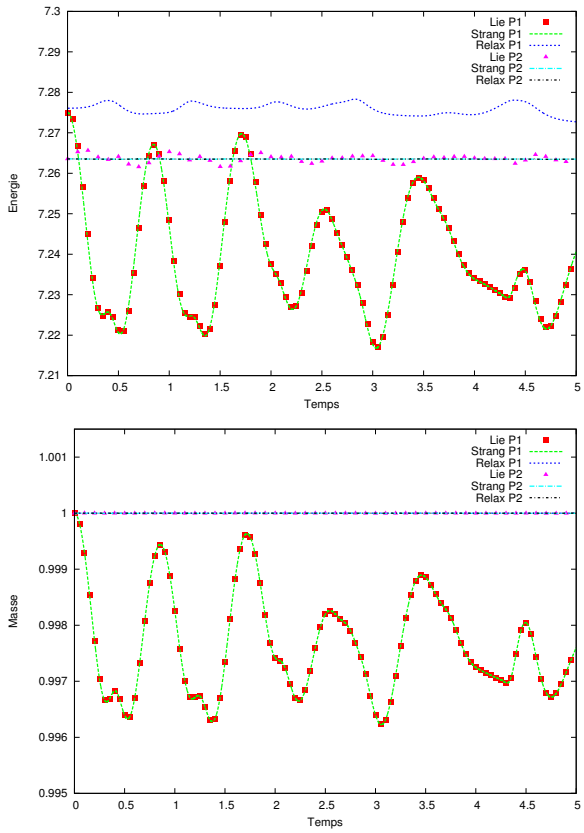


FIGURE 4.3.: Ćas test 1. Évolution de l'énergie et de la masse en fonction du temps pour les trois schémas pour une discrétisation en éléments finis P_1 et P_2.

Nous traçons dans la figure 4.2 la solution obtenue avec le schéma de relaxation aux temps $t = 0$, 0.9, 1.8, 2.7, 3.5 et 4.5 secondes pour une discrétisation en éléments finis P_2. Les solutions obtenues pour les deux autres schémas sont similaires. Il s'agit des temps auxquels la solution a

été tracée dans Bao and Zhang (2005). Dans cet article, le condensat oscille entre deux formes elliptiques allongées, selon l'axe des x ou des y. Pour chaque temps considéré, nous obtenons qualitativement un condensat de même forme.

Vérifions maintenant les propriétés de conservation de nos schémas. Les schémas de splitting conservent la masse mais pas l'énergie (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005). Le schéma de relaxation conserve la masse et l'énergie (Besse, 2004).

Nous avons donc tracé l'évolution de l'énergie et de la masse pour les trois schémas dans la figure 4.3. Nous avons tout d'abord pris une discrétisation en éléments finis P_1. Nous constatons alors que l'énergie est bien conservée par le schéma de relaxation. Elle oscille légèrement avec une amplitude de quelques millièmes. Mais, avec les schémas de splitting, elle diminue fortement, en oscillant avec une amplitude de plusieurs centièmes. Cependant si l'on passe à une discrétisation en éléments finis P_2, les schémas de splitting conservent l'énergie. Le schéma de Strang la conserve tout aussi efficacement que le schéma de relaxation et mieux que le schéma de Lie-Trotter, l'énergie variant avec une amplitude de l'ordre du cent-millième.

Regardons l'évolution de la masse. Nous observons dans la figure 4.3 que le schéma de relaxation la conserve parfaitement pour des éléments finis P_1. Cependant nous observons une légère variation de la masse, de l'ordre du dix-millième pour les schémas de Strang et de Lie-Trotter. Mais encore une fois, le passage à une discrétisation P_2 permet une conservation de la masse beaucoup plus nette.

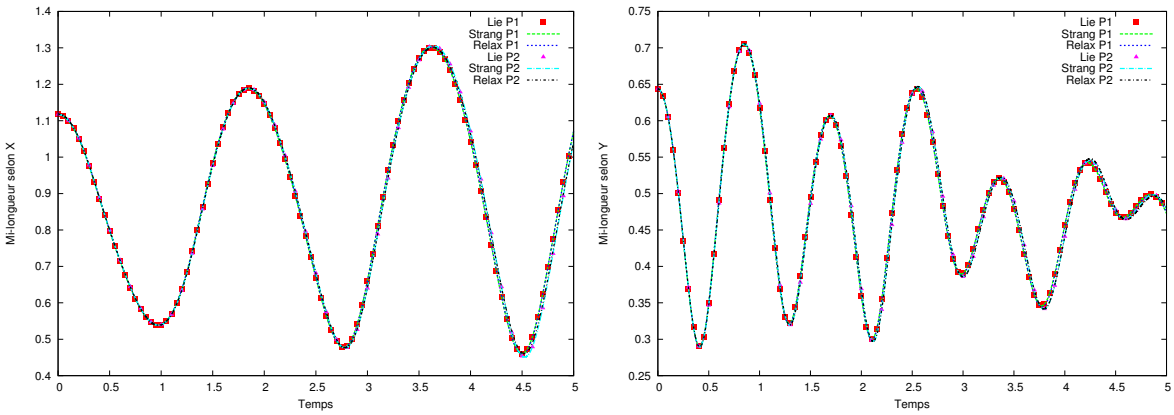


FIGURE 4.4.: Ćas test 1. Évolution au cours du temps de la demi-longueur du condensat selon l'axe des x et selon l'axe des y pour les schémas de Splitting et le schéma de relaxation pour une discrétisation en éléments finis P_1 et P_2.

Dans la figure 4.4, nous avons tracé l'évolution au cours du temps des demi-longueurs du condensat selon les axes des x et des y. Les trois schémas donnent des résultats similaires qui correspondent à ceux attendus de l'article Bao and Zhang (2005). Observons que contrairement à l'évolution de l'énergie, de la masse et du moment cinétique, l'évolution des demis longueurs est capturée avec autant de précision pour la discrétisation en éléments finis P_1 que pour celle en éléments finis P_2.

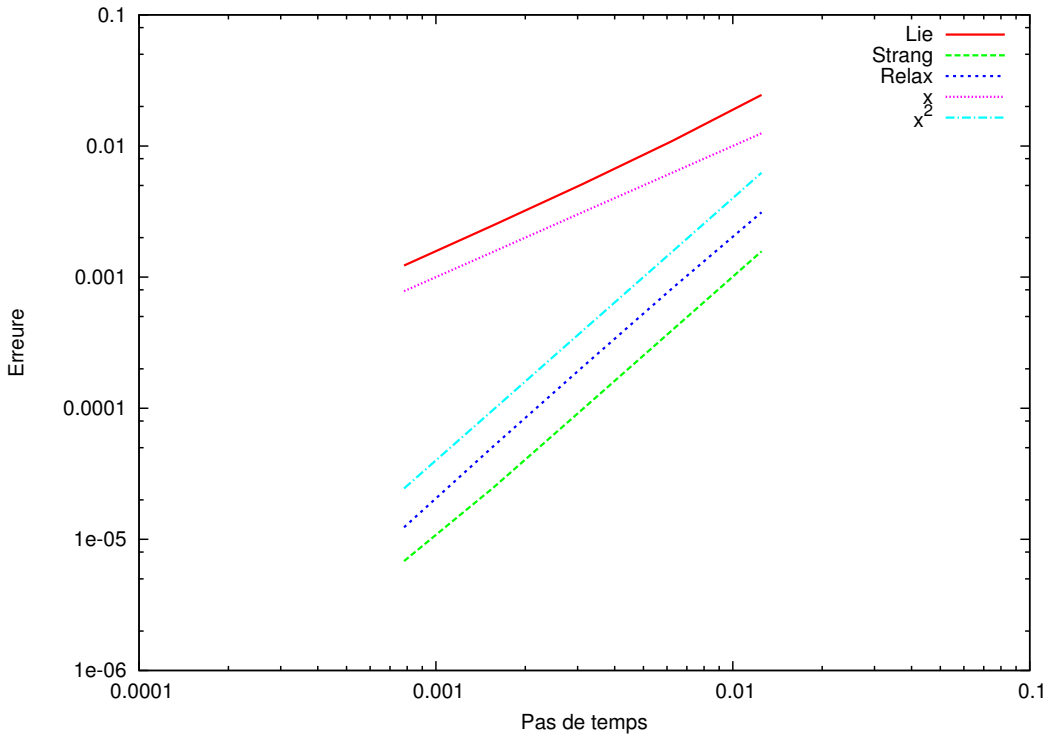


FIGURE 4.5.: Cas test 1. Erreur en norme L^2 en fonction du pas de temps en échelle logarithmique pour les schémas de splitting en temps de Lie-Trotter et de Strang ainsi que pour le schéma de relaxation.

Nous utilisons maintenant cet exemple pour vérifier les ordres de convergence en temps de nos schémas. Pour contrôler l'ordre en temps, nous construisons la solution à $t = 2$ sur un maillage fixe de 14070 nœuds, avec les trois schémas, pour plusieurs pas de temps : $\frac{1}{80}$, $\frac{1}{160}$, $\frac{1}{320}$, $\frac{1}{640}$, et $\frac{1}{1280}$. Nous considérons comme solution exacte, la solution calculée avec un pas de temps égal à $\frac{1}{5000}$. Nous construisons ensuite l'erreur en norme L^2 entre la solution exacte et les solutions approchées que nous traçons en fonction du pas de temps, en échelle logarithmique. Ces erreurs sont reportés dans le tableau 4.1. Sur la figure 4.5 nous avons de plus ajouté à titre de comparaison les courbe $y = x$ et $y = x^2$. En effectuant une régression linéaire, nous trouvons que la pente de la courbe d'erreur pour le schéma de Lie-Trotter est 1.0776325, alors que celle des schémas de Strang et de relaxation est respectivement 1.9685178 et 1.9957888. Le schéma de splitting de Lie-Trotter est donc bien d'ordre un en temps et les schémas de relaxation et de splitting de Strang sont bien d'ordre deux en temps.

pas de temps	1/1280	1/640	1/320	1/160	1/80
Lie-Trotter	0.00122585	0.00248915	0.00513239	0.0109101	0.0245215
Strang	6.82739e-06	2.48536e-05	9.86264e-05	0.000394377	0.00157365
Relax	0.000246971	0.0010268	0.00414226	0.0164169	0.0623311

TABLE 4.1.: Cas test 1. Erreur en norme L^2 en fonction du pas de temps pour les schémas de splitting en temps de Lie-Trotter et de Strang ainsi que pour le schéma de relaxation.

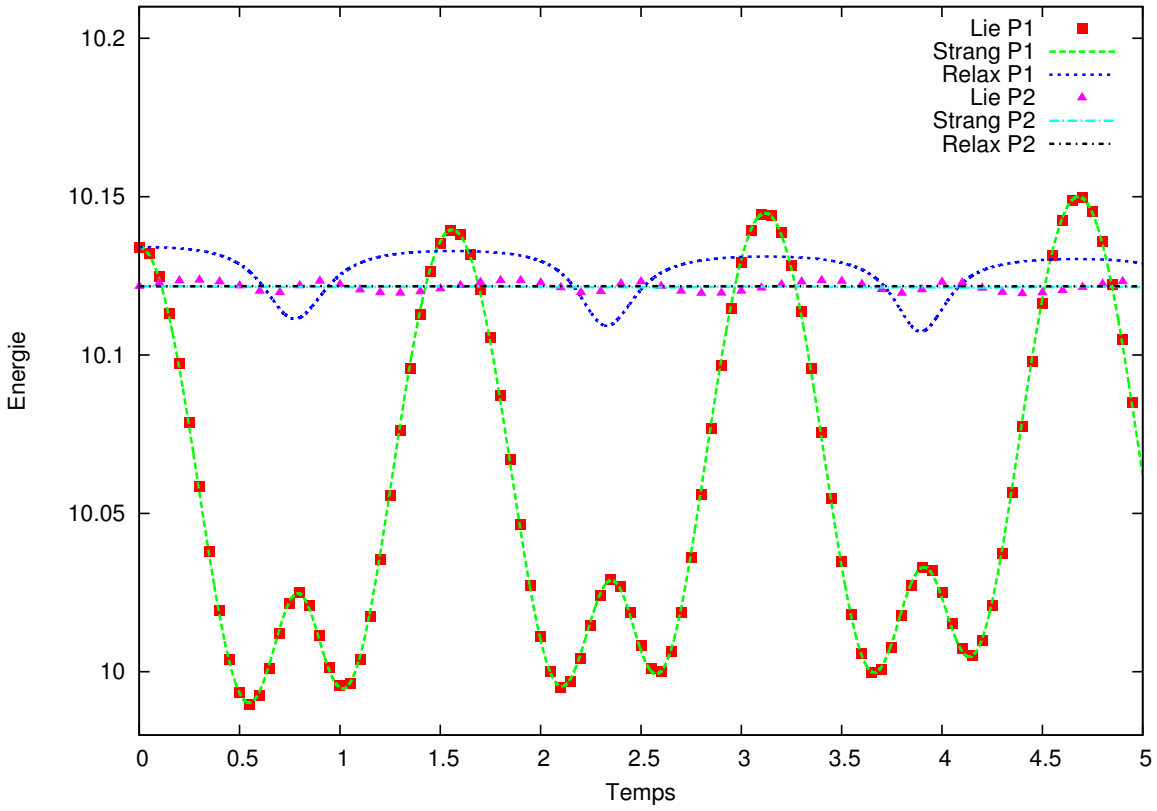


FIGURE 4.6.: Cas test 2. Comparaison de l'évolution de l'énergie pour une discrétisation en éléments finis P_1 à celle d'une discrétisation en éléments finis P_2.

4.3.2. Cas test 2 : Avec rotation, dans un potentiel de piégeage isotrope

Pour ce deuxième exemple, nous avons étudié un cas présenté dans Bao and Zhang (2005). Nous considérons un état fondamental avec un vortex central simple, construit pour un potentiel de piégeage isotrope de fréquences $a_x = a_y = 1$ et une constante de non-linéarité $\beta = 100$, sans rotation. A $t = 0$ nous augmentons les fréquences de piégeage $a_x = a_y = 4$ et nous introduisons une rotation de vitesse élevée $C_\Omega = 0.8$. Nous simulons ensuite l'évolution pour $t \in [0, 5]$ de ce condensat.

Dans la figure 4.6, nous représentons, pour chaque schéma, l'évolution de l'énergie pour des discrétisations en élément finis P_1 et P_2. Nous observons que les schémas de Lie et de Strang, pour une discrétisation en éléments finis P_1, conservent mal l'énergie qui oscille avec une amplitude d'environ $2 \cdot 10^{-1}$. En comparaison, le schéma de relaxation pour la même discrétisation spatiale ne fait varier l'énergie qu'avec une amplitude dix fois inférieure d'environ $2 \cdot 10^{-2}$. Le passage à des éléments finis P_2 permet cependant aux schémas de time-splitting de conserver l'énergie, de manière comparable au schéma de relaxation.

Dans la figure 4.7, nous traçons l'évolution du moment cinétique et de la masse pour chaque schéma et pour chaque discrétisation en espace. Comme le potentiel de piégeage est axisymétrique, le moment cinétique doit être conservé (Bao and Cai, 2013a). Nous constatons que la conservation de la masse et du moment sont mauvaises pour les schémas de time-splitting pour une discrétisation en éléments finis P_1. Cependant le schéma de relaxation conserve ces quantités avec beaucoup de précision, même en utilisant des éléments finis P_1. L'utilisation

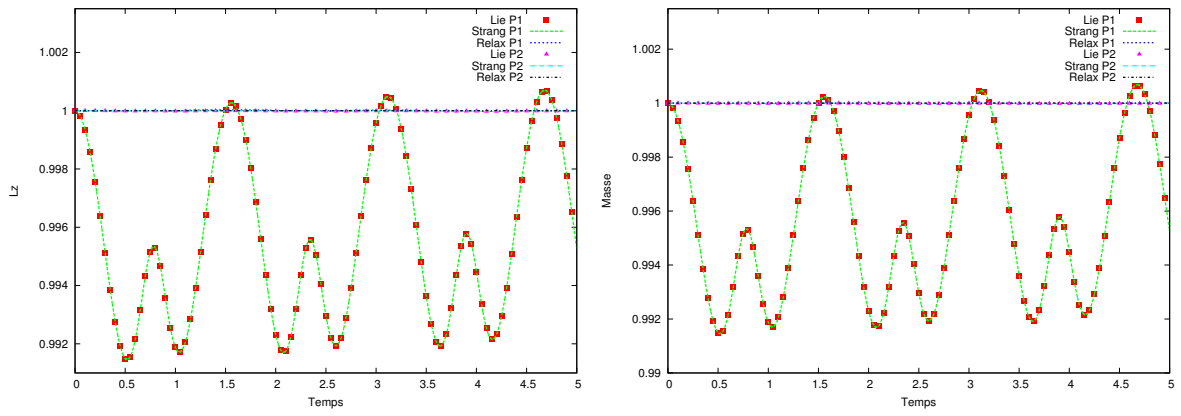


FIGURE 4.7.: Cas test 2. Comparaison de l'évolution du moment cinétique et de la masse pour une discrétisation en éléments finis P_1 à celles d'une discrétisation en éléments finis P_2.

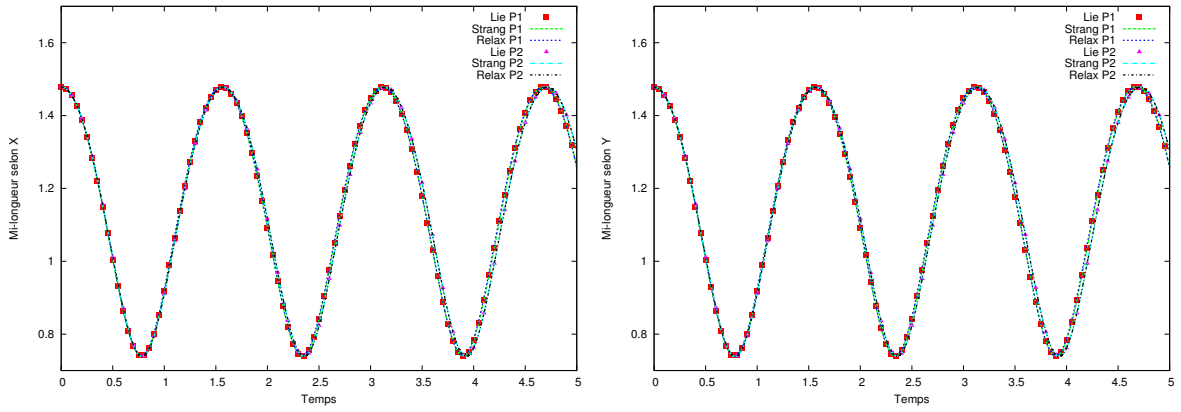


FIGURE 4.8.: Cas test 2. Comparaison de l'évolution de la demie longueur selon l'axe des x et selon l'axe des y pour une discrétisation en éléments finis P_1 à celles d'une discrétisation en éléments finis P_2.

d'éléments finis P_2 apparaît donc comme nécessaire pour les schémas de time-splitting mais pas pour le schéma de relaxation.

Dans la figure 4.8, nous avons tracé l'évolution des demi-longueurs du condensat selon l'axe des x et selon l'axe des y. La taille du condensat doit varier de la même manière selon les deux axes car le potentiel de piégeage est axisymétrique. Les deux figures étant identiques, cette affirmation est respectée par notre simulation. De plus, la variation de la taille du condensat de période environ $\frac{\Pi}{2}$ correspond à ce qui est développé dans l'article Bao and Zhang (2005). Pour chaque discrétisation en espace, les courbent des trois schémas se superposent. Cependant, un léger décalage s'observe entre les courbes de la discrétisation en éléments finis P_1 et celles de la discrétisation en éléments finis P_2 pour $t \geq 4$.

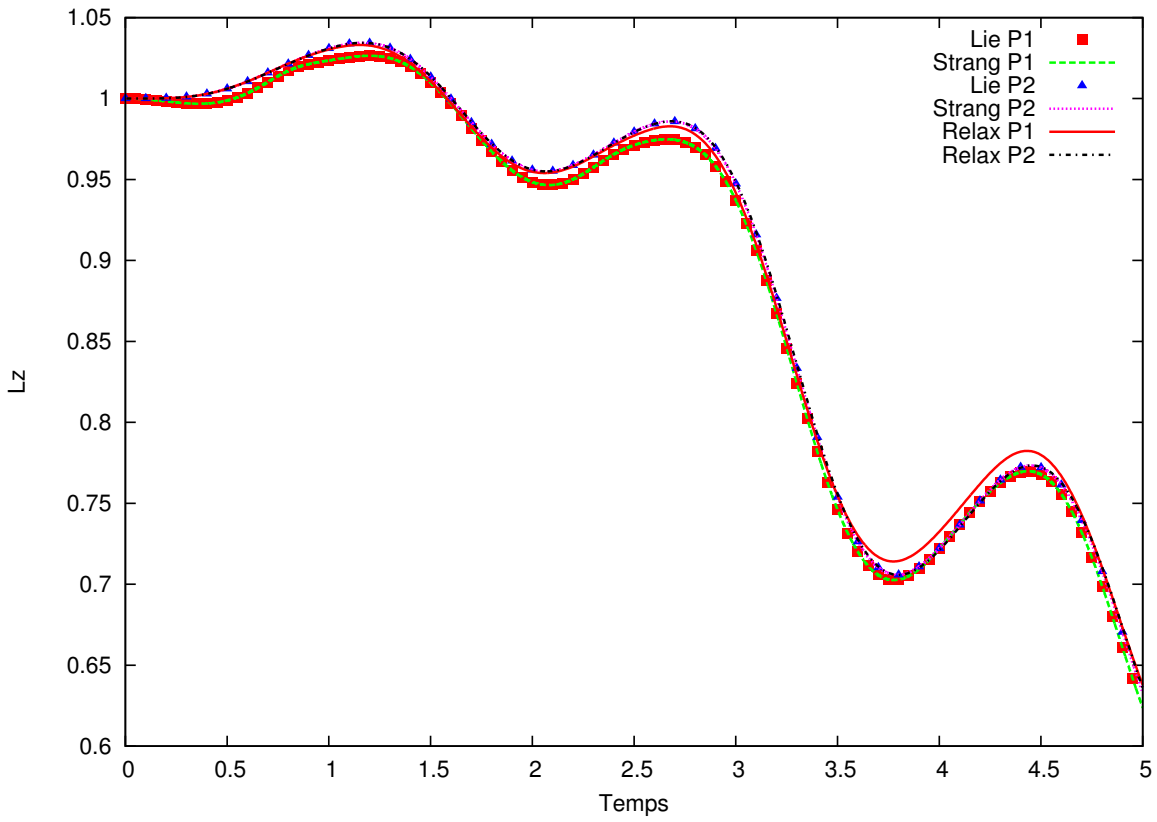


FIGURE 4.9.: Cas test 3. Comparaison de l'évolution du moment cinétique pour une discrétisation en éléments finis P_1 à celui d'une discrétisation en éléments finis P_2.

4.3.3. Cas test 3 : Avec rotation, dans un potentiel de piégeage anisotrope

Nous avons repris ici un test effectué dans Bao and Zhang (2005). Ce test de calcul a aussi été réalisé avec une discrétisation spectrale par Christophe Besse de l'université de Toulouse 3 Paul Sabatier. Ainsi nous pouvons comparer les résultats obtenues avec des éléments finis à ceux obtenues avec une discrétisation spectrale. Dans ce cas test, nous considérons un état fondamental construit avec un potentiel de piégeage isotrope dont les fréquences sont $a_x = a_y = 1$ et une constante de non linéarité $beta = 100$, sans rotation. Au temps $t = 0$ nous lançons le problème d'évolution en temps avec des paramètres différents. Nous considérons en effet un potentiel de piégeage anisotrope avec les fréquences de piégeage $a_x = 1.8^2$ et $a_y = 2^2$ et une grande vitesse de rotation $C_\Omega = 0.8$. L'état avec un vortex n'est alors plus un état fondamental. Pour une vitesse de rotation aussi élevée, l'état fondamental présenterait de multiples vortex.

Dans la figure 4.9 est représentée l'évolution du moment cinétique pour des discrétisations en élément finis P_1 et P_2 pour les trois schémas d'évolution en temps. Les trois courbes représentant la discrétisation en éléments finis P_2 se superposent. Celles de la discrétisation en éléments finis P_1 sont légèrement décalé. Cependant, pour des temps compris entre 3.5 et 4.7 secondes, les deux courbes représentant les schémas de splitting pour des éléments finis P_1 se superposent à celles des éléments finis P_2 alors que la courbe représentant le schéma de relaxation pour des éléments finis P_1 s'en éloigne. Ceci laisse suggérer que l'utilisation d'éléments finis P_2 est nécessaire pour le schéma de relaxation.

Dans la figure 4.10 nous avons tracé l'évolution de l'énergie et de la masse pour les trois

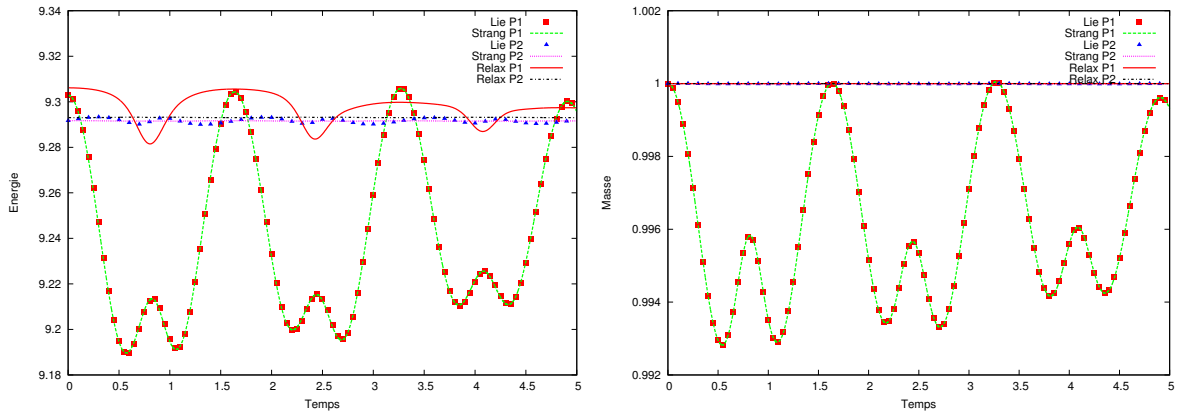


FIGURE 4.10.: Cas test 3. Comparaison de l'évolution de l'énergie et de la masse pour une discrétisation en éléments finis P_1 à celles d'une discrétisation en éléments finis P_2.

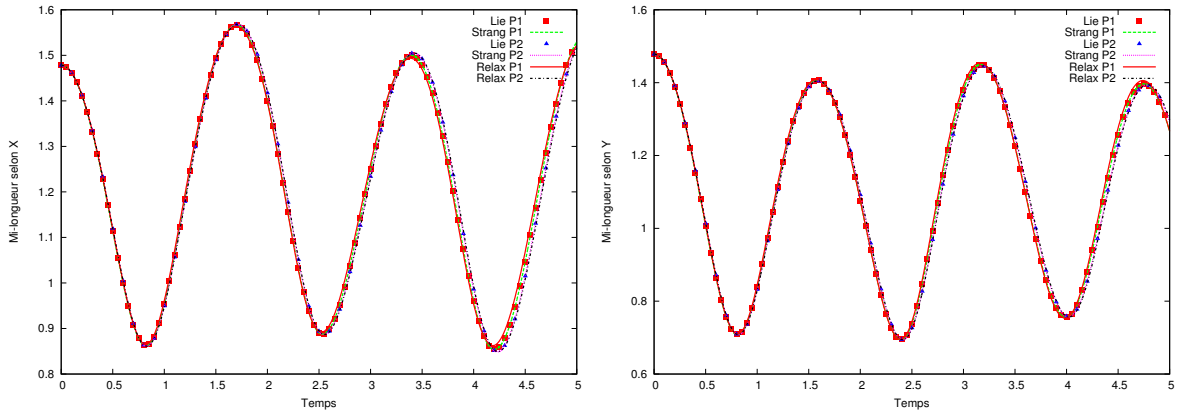


FIGURE 4.11.: Cas test 3. Comparaison de l'évolution de la demie longueur selon l'axe des x et selon l'axe des y pour une discrétisation en éléments finis P_1 à celles d'une discrétisation en éléments finis P_2.

schémas d'évolution en temps. Nous comparons ainsi le calcul effectué pour une discrétisation en éléments finis P_1 à celui d'une discrétisation en éléments finis P_2. Nous constatons que l'énergie oscille avec une amplitude élevée d'environ $2 \cdot 10^{-1}$ pour les schémas de splitting et d'environ $2 \cdot 10^{-2}$ pour le schéma de relaxation lorsque l'on considère la discrétisation en éléments finis P_1. Notons, tout d'abord, que l'énergie est bien mieu conservée par le schéma de relaxation. Pour une discrétisation en éléments finis P_2, cette amplitude est bien plus faible, d'environ $4 \cdot 10^{-4}$ pour les trois schémas. Il apparaît donc comme nécessaire, dans ce cas test, d'utiliser une discrétisation P_2, si l'on souhaite que l'énergie soit bien conservée. En ce qui concerne l'évolution de la masse, nous observons que pour une discrétisation en éléments finis P_1 la variation de la masse avec les schémas de time-splitting est grande, d'environ $1 \cdot 10^{-2}$. En comparaison, le schéma de relaxation pour des éléments finis P_1 la conserve aussi bien que les trois schémas pour une discrétisation en éléments finis P_2. Encore une fois, l'utilisation d'éléments finis P_2 est primordiale pour les schémas de time-splitting.

Dans la figure 4.11 nous observons l'évolution des demi-longueurs du condensat selon l'axe des x et selon l'axe des y. Les trois courbes représentant les discrétisations en éléments finis

P_2 se superposent. Les trois courbes représentant les discrétisations en éléments finis P_1 sont superposés mais légèrement décalés par rapport à celles de la discrétisation P_2. Néanmoins, l'évolution des demi-longueurs du condensat est bien captée dans les six situations, la variation de période environ $\frac{\Pi}{2}$ correspondant à ce qui est trouvé dans l'article Bao and Zhang (2005).

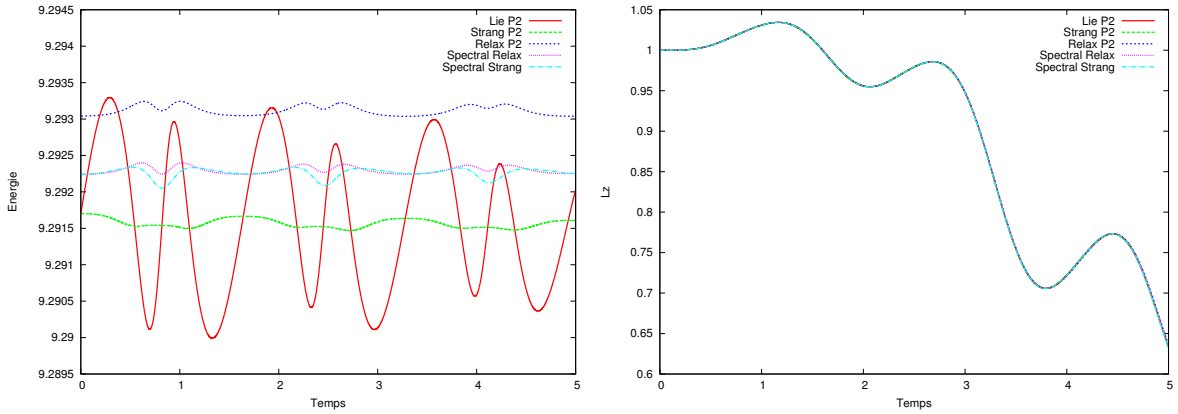


FIGURE 4.12.: Cas test 3. Comparaison de l'évolution de l'énergie et du moment cinétique pour une discrétisation en éléments finis P_2 à ceux d'une discrétisation spectrale.

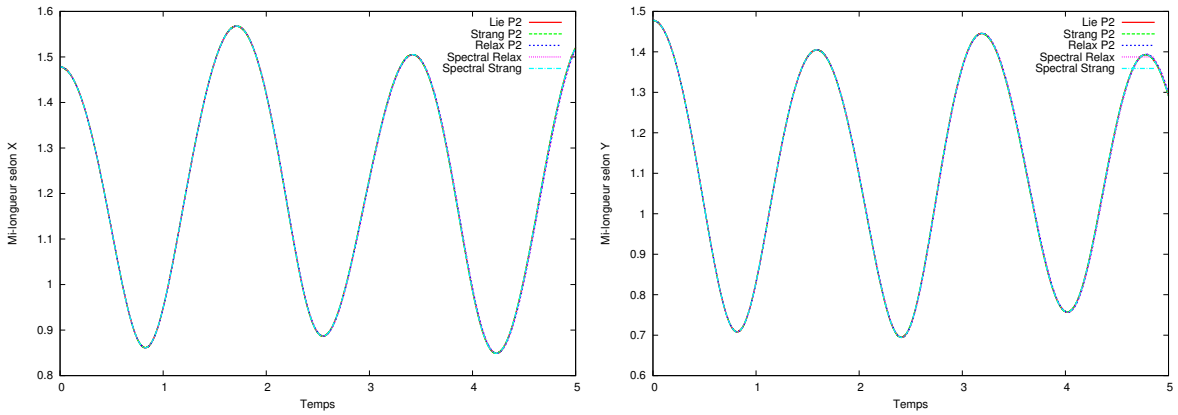


FIGURE 4.13.: Cas test 3. Comparaison de l'évolution de la demie longueur du condensat selon l'axe des x et selon l'axe des y pour une discrétisation en éléments finis P_2 à celles d'une discrétisation spectrale.

Nous avons ensuite comparé dans la figure 4.12 la conservation de l'énergie pour une discrétisation spatiale P_2 à celle obtenue pour une discrétisation spatiale spectrale. Nous notons tout d'abord que le schéma de splitting de Lie-Trotter présente une grande variation d'énergie en comparaison des autres schémas. Ensuite, nous pouvons constater que dans le cas des schémas de relaxation et de splitting de Strang la conservation de l'énergie pour une discrétisation en éléments P_2 est similaire à celle obtenue pour une discrétisation spectrale.

Finalement, nous comparons dans les figures 4.12 et 4.13 l'évolution du moment cinétique et des demi-longueurs du condensat selon l'axe des x et l'axe des y. Les courbes se superposent parfaitement, ce qui signifie que nos simulations utilisant les schémas de Lie-Trotter, de Strang et de relaxation pour une discrétisation en éléments finis P_2 ont aussi bien calculés ces quantités que les simulations utilisant ces mêmes schémas pour une discrétisation spatiale spectrale.

4.4. Adaptation de maillage et conservation de la masse

Nous reprenons le dernier cas test de la section précédente avec une discrétisation spatiale en éléments finis P_2. Nous ré-effectuons la même simulation avec le schéma de splitting de Strang mais en adaptant au fur et à mesure le maillage à la solution calculée. Nous traçons alors l'évolution de la masse sur la figure 4.14 et nous la comparons à l'évolution de la masse lorsqu'il n'y a pas d'adaptation de maillage. Nous constatons alors qu'il y a une perte de masse au cours de la simulation avec adaptation de maillage. A chaque fois que l'on effectue une adaptation de maillage, nous interpolons la solution sur le nouveau maillage. C'est cette interpolation qui génère une perte de masse. Cependant, dans cette simulation, le nombre d'itération est de 10000 et à raison d'une adaptation toute les 10 itérations nous avons effectué 1000 adaptations de maillage. Ces 1000 adaptations de maillage n'ont généré qu'une perte de quatre dix-millièmes de la masse. Cette perte de masse reste donc assez faible mais s'avère problématique pour de longues simulations.

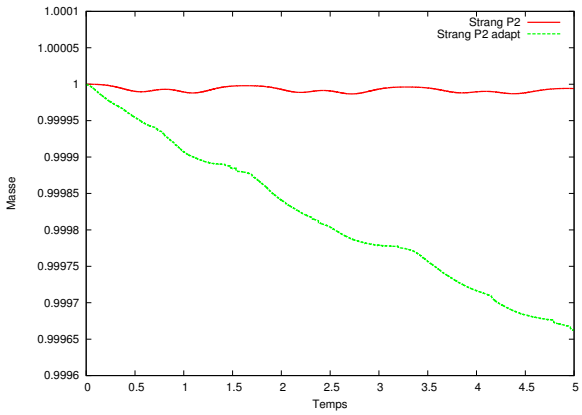


FIGURE 4.14.: Cas test 3. Comparaison de l'évolution de la masse du condensat pour une simulation avec adaptation de maillage avec celle sans adaptation de maillage.

4.5. GPFEM-inst, une toolbox éléments finis pour la résolution de l'équation instationnaire

4.5.1. Description des programmes

De même que pour l'équation stationnaire, une toolbox basée sur le logiciel d'éléments finis FreeFem++, et nommée GPFEM-inst, rassemble les méthode développées et permet de lancer avec aisance des simulations de l'évolution en temps d'un condensat de Bose-Einstein. Les méthodes de time-splitting ainsi que la méthode de relaxation peuvent ainsi être utilisées pour des simulations en 2D ou en 3D avec des discrétisations spatiales en éléments finis P_1 ou P_2. La toolbox, précédemment évoquée pour les calculs stationnaires, a été incluse à ce nouvel outil. L'utilisateur peut ainsi construire un état stationnaire et simuler par la suite son évolution en temps. Les fichiers de paramètres du cas stationnaire ont été conservés pour la construction de l'état initial. Deux nouveaux fichiers de paramètres permettent ensuite d'entrer des données pour la simulation en temps réel. Le premier fichier permet de définir le potentiel de piégeage, dépendant ou non du temps, que l'on souhaite utiliser. Le deuxième fichier permet de fixer le choix de la méthode, le choix de calculer préalablement l'état stationnaire, ainsi que divers paramètres tels que le pas de temps, la précision du maillage, le choix d'utilisation d'éléments finis P_1 ou P_2 et de l'adaptation de maillage. Pour une description plus précise de ces fichiers de paramètres, nous nous référons à l'annexe C.

Architecture du programme informatique

La figure 4.15 illustre l'architecture de la version 3D de cet outil informatique. La version 2D est similaire.

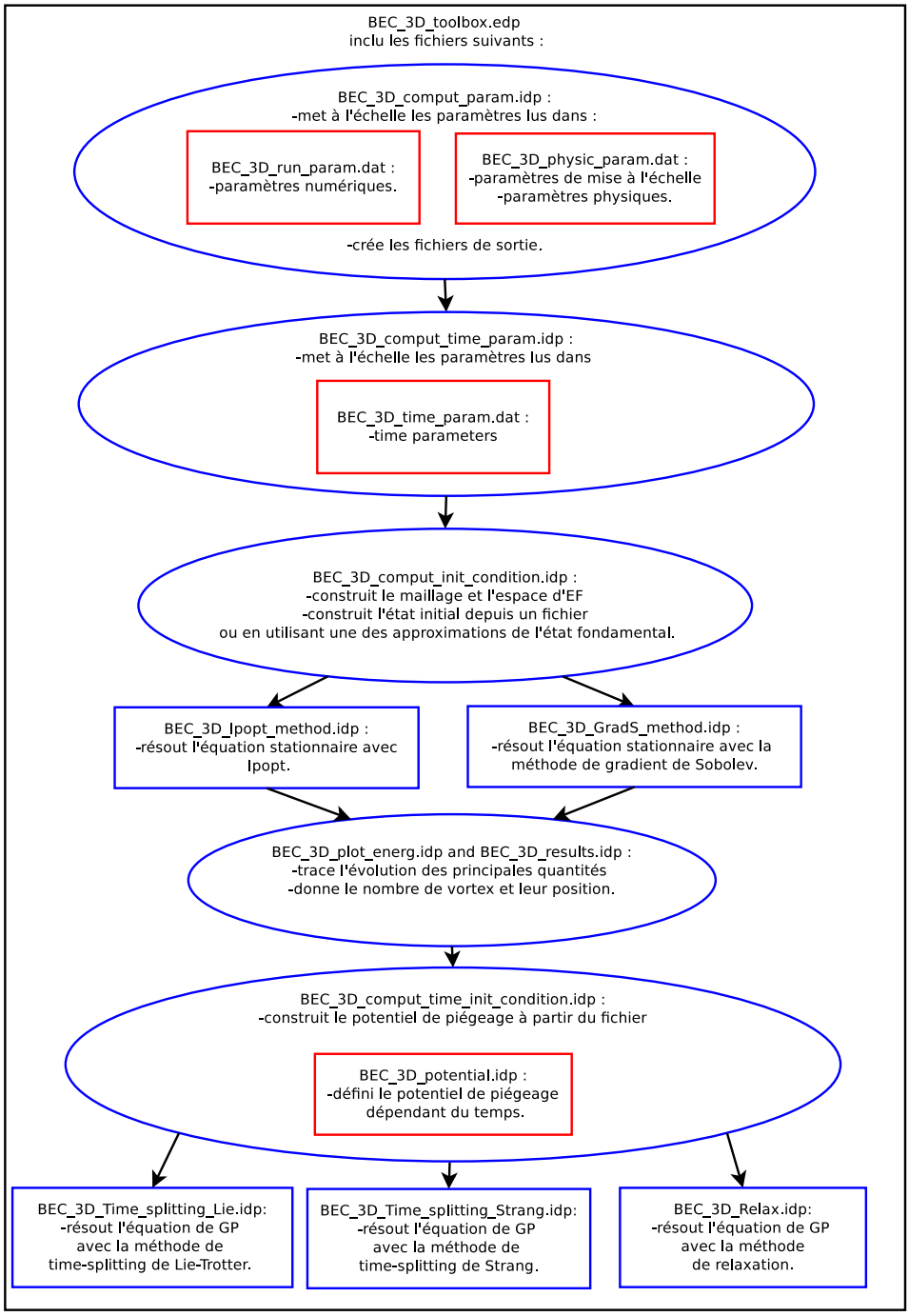


FIGURE 4.15.: Architecture du programme informatique de la toolbox 3D, GPFEM-inst.

Nous présentons par la suite quelques exemples de simulations réalisées avec ce nouveau programme.

4.5.2. Stabilité d'un vortex central dans un condensat sans rotation en 2D

Un autre exemple bien connu est l'étude de la stabilité d'un vortex central de charge unité dans le condensat et de l'instabilité d'un vortex de charge supérieure à 1. Nous avons repris les données de l'exemple se trouvant dans (Bao and Zhang, 2005). Nous commençons la simulation avec un état fondamental construit avec les données $a_x = 1$, $a_y = 1$ et $\beta = 100$. Grâce à la résolution en 1D du problème axisymétrique (voir section 3.1.3) nous pouvons construire un état fondamental contenant un vortex de charge $m = 1$ ou $m = 2$. Pour une discrétisation en éléments finis P_1 et P_2, nous résolvons ensuite le problème d'évolution en temps (2.3.3) avec les trois schémas, perturbé par un agitateur gaussien :

$$W(t, \mathbf{x}) = W_s(t)\, exp\left(-\left[\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x_s}(t)|^2}{\frac{w_s}{2}}\right]\right) \tag{4.5.1}$$

où

$$W_s(t) = W_0\, sin^2(4t). \tag{4.5.2}$$

L'énergie totale n'est plus conservée car le potentiel de piégeage dépend maintenant du temps dans (2.3.3) :

$$C_{\text{trap}}(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{2}\left(a_x x^2 + a_y y^2\right) + W(t, \mathbf{x}). \tag{4.5.3}$$

Il est nécessaire de calculer sa primitive pour la résolution de l'étape (4.1.8) dans l'algorithme des schémas de time-splitting :

$$\int_{t_n}^{t} W(s, \mathbf{x}) ds = \frac{1}{2} W_0 \left(t - t_n - \frac{1}{4}(sin(4t) - sin(4t_n))\right) exp\left(-\left[\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x_s}(t)|^2}{\frac{w_s}{2}}\right]\right) \tag{4.5.4}$$

Nous prenons comme paramètres pour la simulation $W_0 = 10$ si $t < \frac{\pi}{2}$ et $W_0 = 0$ si $t > \frac{\pi}{2}$, $x_s(t) = x_s = 3$ et $y_s(t) = y_s = 0$.

Dans les figures 4.16 et 4.17, nous avons calculé et tracé le champs de vitesse par la formule :

$$V = Imag(u \nabla u^*)/|u|^2. \tag{4.5.5}$$

Nous avons effectué cette simulation avec des éléments finis P_1 et P_2. Nous n'avons constaté que très peu de différences entre les résultats des deux discrétisations. Nous présentons dans les figures ceux obtenus avec une discrétisation P_1.

La figure 4.16 présente à différents temps, le champs de vitesse d'une solution présentant à $t = 0$ un vortex central de charge unité, calculé avec la méthode de Strang. Nous constatons alors que le vortex de charge unité reste dans le condensat et ne s'éloigne pas trop de son centre malgré la perturbation gaussienne imposée. En comparaison, dans la figure 4.17, nous traçons le champs de vitesse, aux mêmes temps, dans le cas d'une initialisation avec un vortex central de charge 2. Nous constatons alors que le vortex se dédouble en deux vortex qui restent proches l'un de l'autre et proches du centre. Ces résultats sont similaires, quelque soit le schéma utilisé, et correspondent à ceux établis dans Bao and Zhang (2005).

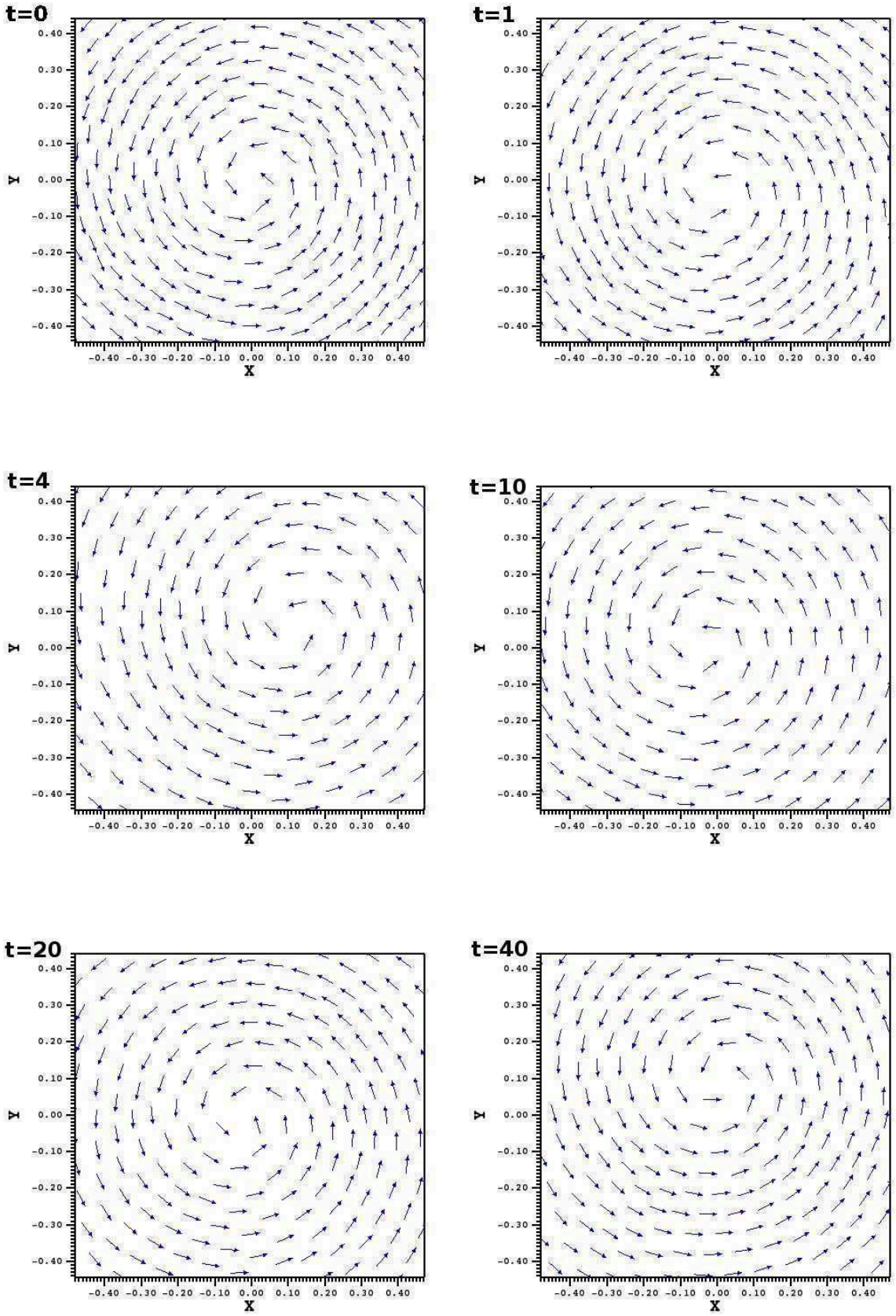


FIGURE 4.16.: Stabilité d'un vortex en 2D. Champs de vitesse pour une initialisation avec un vortex central de charge m=1 en utilisant le schéma de splitting de Strang.

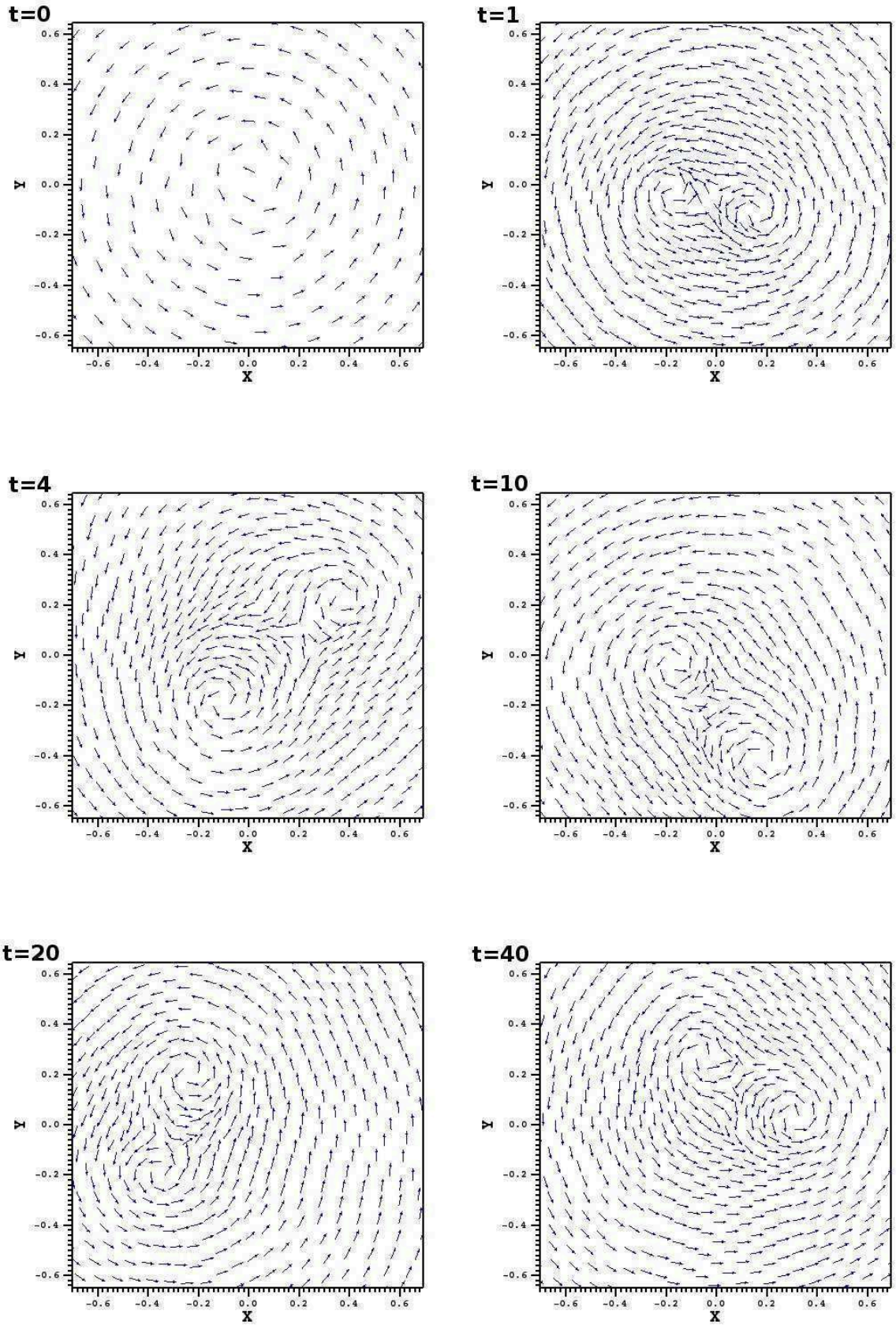
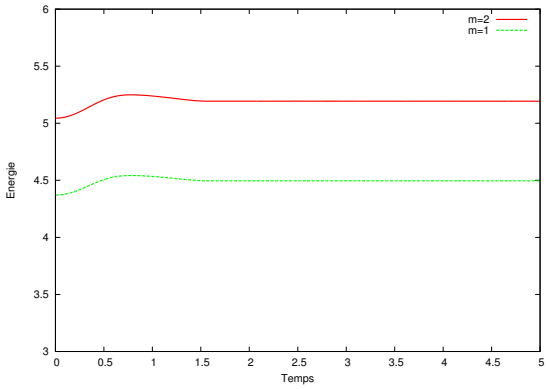
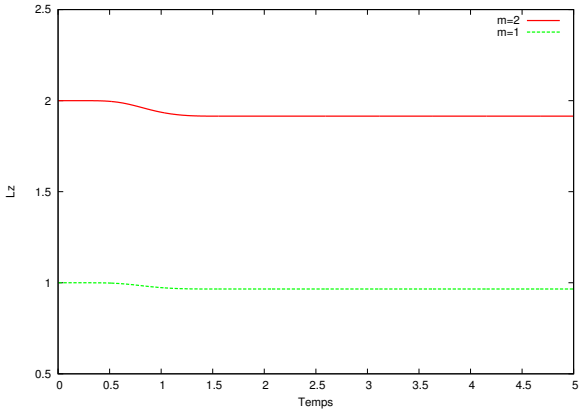


FIGURE 4.17.: Stabilité d'un vortex en 2D. Champs de vitesse pour une initialisation avec un vortex central de charge m=2 en utilisant le schéma de splitting de Strang.

Dans la figure 4.18, nous avons tracé l'évolution de l'énergie, du moment cinétique et de la masse en fonction du temps et constatons que l'énergie et le moment cinétique restent constants à partir du moment où le perturbateur a été retiré à $t = \pi/2$. En effet, dans ce cas, le potentiel de piégeage ne dépend plus du temps et est isotrope donc ces deux quantités doivent être conservées. La masse, quant à elle, reste bien constante, égale à 1, durant toute la simulation. Lorsque les deux autres schémas sont utilisés, les résultats sont similaires. Ils sont cohérents et en accord avec ceux obtenues dans Bao and Zhang (2005).





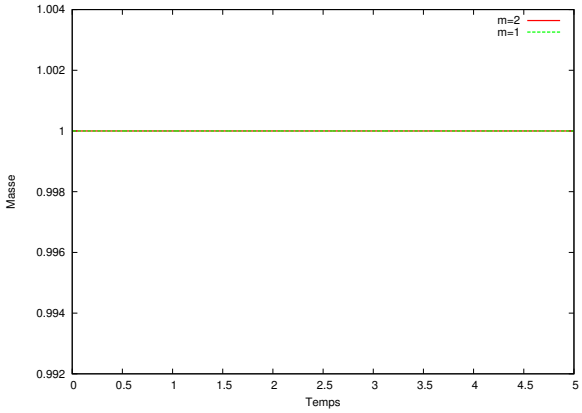


FIGURE 4.18.: Stabilité d'un vortex en 2D. Évolution de l'énergie, du moment cinétique et de la masse pour une initialisation avec un vortex central de charge m=1 et m=2 en utilisant le schéma de relaxation.

4.5.3. Dynamique d'un réseau de vortex en 2D perturbé par un agitateur gaussien

Nous avons utilisé la méthode de relaxation et des éléments finis P_2 pour simuler un réseau de vortex dans un condensat en rotation rapide sous l'action d'une perturbation externe anisotrope. Il s'agit d'une simulation difficile à effectuer et réalisée dans Bao et al. (2013a), Bao and Shen (2005) et Antoine et al. (2013). Nous partons initialement d'un état fondamental construit avec la méthode utilisant Ipopt, pour un potentiel de piégeage isotrope de paramètres $a_x = a_y = 1$, une vitesse de rotation de 0.9 et une constante de non-linéarité $beta = 1000$. Pour $t \geq 0$, nous introduisons le perturbateur :

$$W(t, \mathbf{x}) = \frac{\tilde{\epsilon}}{2} a_x^2 \left((x^2 - y^2) \cos(2\tilde{\Omega} t) + 2xy \sin(2\tilde{\Omega} t) \right). \tag{4.5.6}$$

Le potentiel de piégeage s'écrit alors :

$$\begin{aligned} C_{\text{trap}}(t, \mathbf{x}) &= \frac{1}{2} \left(a_x x^2 + a_y y^2 \right) + W(t, \mathbf{x}) \\ &= \frac{a_x}{2} \left((1 + \tilde{\epsilon}) X(t)^2 + (1 - \tilde{\epsilon}) Y(t)^2 \right), \end{aligned}$$

où

$$X(t) = x\cos(\tilde{\Omega}t) + y\sin(\tilde{\Omega}t) \quad \text{et} \quad Y(t) = y\cos(\tilde{\Omega}t) - x\sin(\tilde{\Omega}t).$$

Nous prenons les paramètres $\tilde{\epsilon} = 0.35$ et $\tilde{\Omega} = 0.75$. La figure 4.19 présente les résultats obtenus à des temps t allant de $0s$ à $10s$. L'état initial présente 52 vortex, et il a une forme circulaire. Sous l'effet du potentiel anisotrope le condensat se déforme ensuite aux temps $t = 1,6s$ et $t = 4s$. Puis, il pivote vers la gauche sous l'effet de la rotation aux temps $t = 5.6s$ et $t = 7s$. Au final il revient à son état initial à $t = 10s$. Pendant toute la simulation, le nombre de vortex reste égale à 52. Ceci est en accord avec les simulations effectuées précédemment dans Bao et al. (2013a), Bao and Shen (2005) et Antoine et al. (2013).

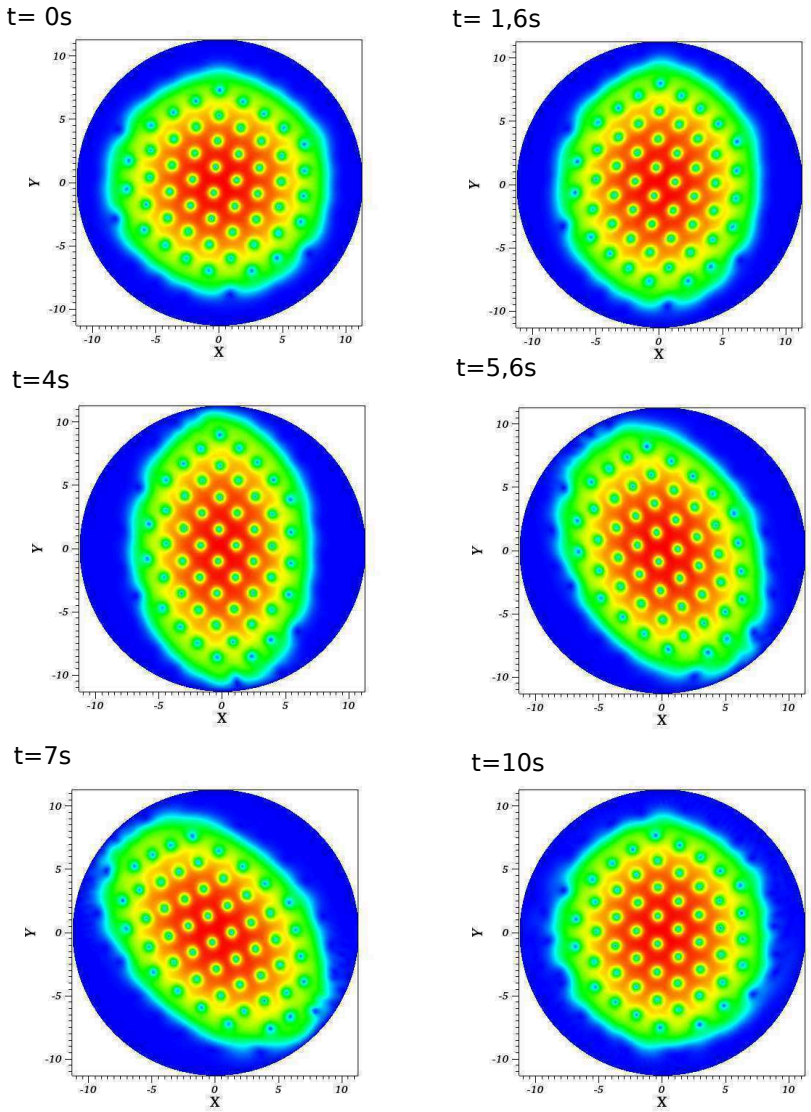


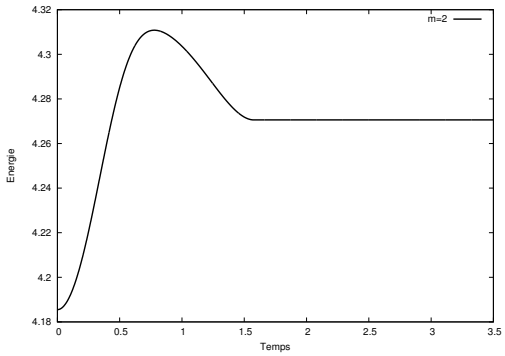
FIGURE 4.19.: Dynamique d'un réseau de vortex en 2D perturbé par un agitateur gaussien. Densité $\rho = |u|^2$ du condensat de Bose-Einstein en rotation. Potentiel isotrope avec $a_x = a_y = 1$, $C_\Omega = 0.9$ et $\beta = 1000$

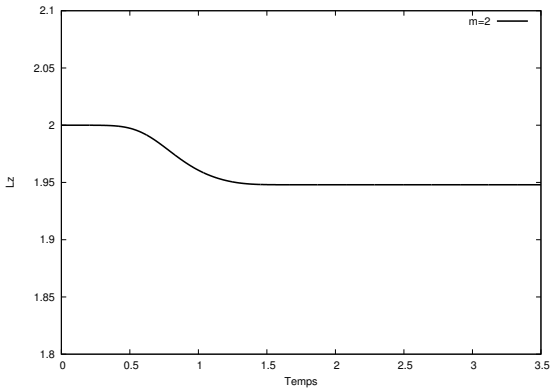
4.5.4. Instabilité d'un vortex central de charge deux dans un condensat sans rotation en 3D

Afin d'illustrer les possibilités en 3D de notre toolbox, nous avons repris le cas test de l'instabilité d'un vortex de charge deux présenté précédemment en 2D (voir le paragraphe 4.5.2). Nous commençons la simulation avec un état fondamental construit avec un potentiel de piégeage isotrope de paramètres $a_x = 1$, $a_y = 1$, $a_z = 1$ et $\beta = 100$. Grâce à la résolution en 2D du problème axisymétrique, (voir section 3.1.3) nous pouvons construire un état fondamental contenant un vortex de charge $m = 2$. Nous résolvons ensuite le problème d'évolution en temps (2.3.3), perturbé par un agitateur gaussien similaire à celui du cas 2D (4.5.1). Nous avons utilisé des maillages adaptés à la solution toutes les 10 itérations.

Sur la figure 4.21, nous avons tracé une isosurface de la densité $\rho = |u|^2$ du condensat évoluant des temps $t = 0s$ à $t = 1,5s$. Nous constatons que le vortex de charge deux se dédouble en deux vortex qui restent proches l'un de l'autre et proches du centre. Cela correspond aux résultats de l'exemple en 2D. Cependant la visualisation en 3D permet de voir que les deux vortex restent collés l'un à l'autre par leurs extrémités en ne se séparent pas entièrement.

Dans la figure 4.20, nous avons tracé l'évolution de l'énergie et du moment angulaire en fonction du temps et constatons qu'ils restent bien constants à partir du moment où le perturbateur a été retiré à $t = \pi/2$. Nous observons cependant une légère perte de masse due à l'utilisation de l'adaptation de maillage dans cette simulation. Cette perte cesse à $t = \frac{\pi}{2}$ car nous arrêtons d'effectuer des adaptations de maillage à partir du moment où le perturbateur gaussien est retiré.





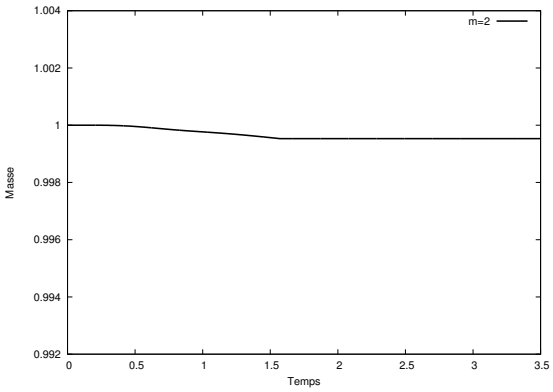


FIGURE 4.20.: Évolution de l'énergie, du moment angulaire et de la masse en fonction du temps pour une simulation en 3D d'un condensat avec un vortex central de charge m=2. . Potentiel isotrope avec $a_x = 1$, $a_y = 1$, $a_z = 1$ et $\beta = 100$.

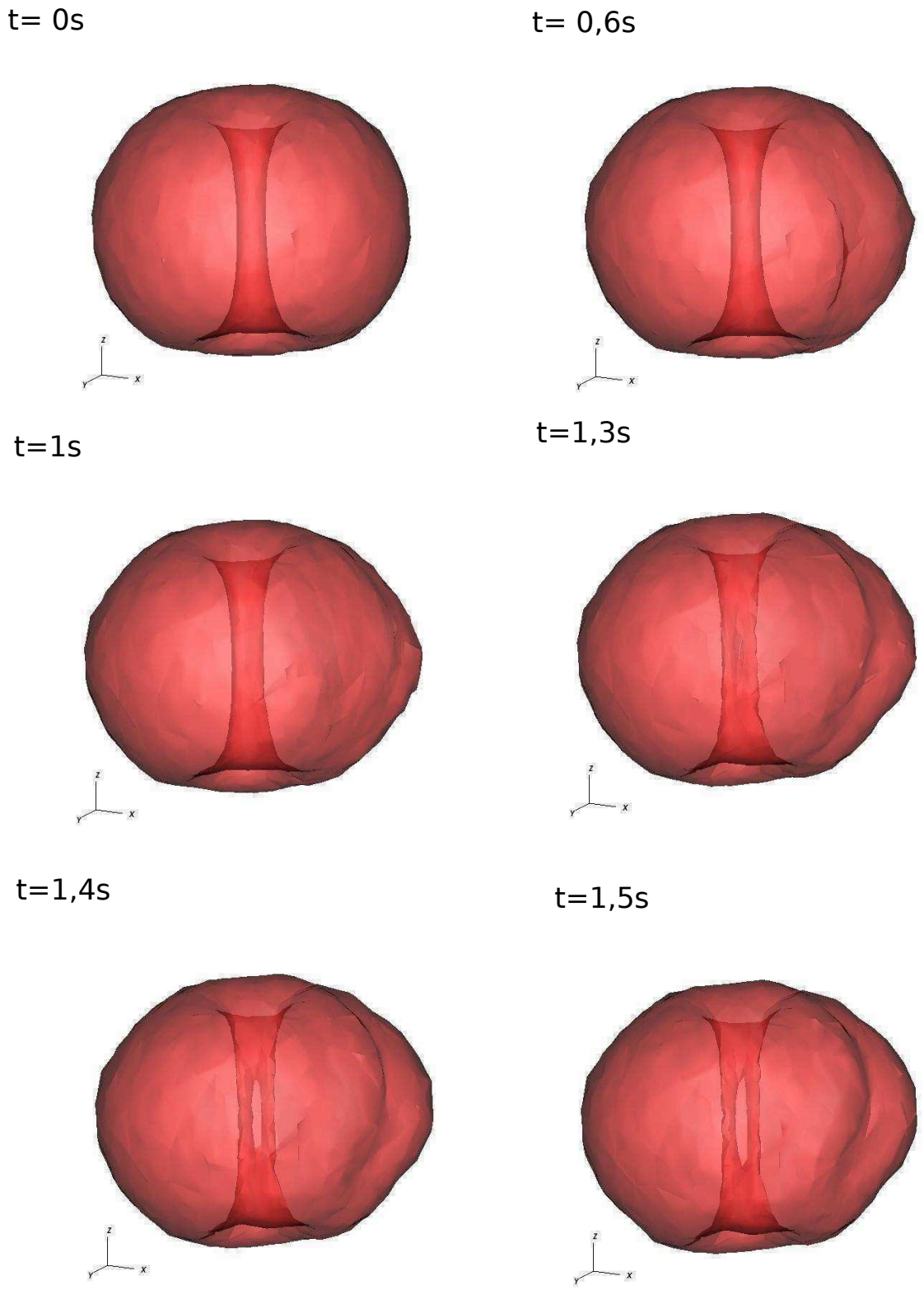


FIGURE 4.21.: Isosurfaces de le densité $\rho = |u|^2$ d'un condensat de Bose-Einstein contenant un vortex de charge deux en son centre. Potentiel isotrope avec $a_x = 1$, $a_y = 1$, $a_z = 1$ et $\beta = 100$.

4.6. Conclusion

- En utilisant une discrétisation spatiale avec des éléments finis, nous avons programmé grâce au logiciel FreeFem++ deux méthodes pour la résolution de l'équation d'évolution en temps de Gross-Pitaevskii :
  1. La première méthode utilisée est celle du time-splitting combinée avec un schéma de Crank-Nicolson. Nous avons vu qu'elle est d'ordre un en temps lorsqu'il s'agit du splitting de Lie-Trotter et d'ordre deux pour le splitting de Strang. De plus, cette méthode est inconditionnellement stable, respecte la réversibilité en temps, l'invariance par changement de jauge et la conservation de la masse mais pas celle de l'énergie (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005).
  2. La deuxième méthode est un schéma de relaxation proposé dans (Besse, 2004). Il est d'ordre deux en temps, inconditionnellement stable et préserve la masse et l'énergie. De plus, il vérifie la propriété de réversibilité en temps mais pas celle d'invariance par changement de jauge.
- Après avoir vérifié l'ordre de convergence et les propriétés de conservation de ces schémas sur trois cas test, nous avons montré que la discrétisation spatiale en élément-finis P_2 permet une précision comparable à celle obtenue avec des méthodes spectrales.

- Nous avons incorporé à ces méthodes l'adaptation de maillage, préalablement utilisée pour les schémas du cas stationnaires, et constaté que cela engendrait une perte de masse et d'énergie due aux interpolations effectuées.

- Ces méthodes ont été rassemblées dans une nouvelle toolbox. Cette dernière permet de lancer aisément des simulations en choisissant la méthode appropriée. L'utilisateur peut choisir entre une discrétisation en éléments finis P_1 ou P_2, utiliser un potentiel de piégeage qui dépend du temps.

- Grâce à cette toolbox, nous avons simulé des cas tests difficiles :
  1. les évolutions en 2D d'un vortex central de charge unité et d'un vortex central de charge deux dans un condensat perturbé par un agitateur gaussien, sans rotation ;
  2. l'évolution en 2D d'un condensat de Bose-Einstein en rotation présentant un réseau de vortex d'Abrikosov dense, et agité par un champ anisotrope ;
  3. l'évolution en 3D d'un vortex central de charge deux et sa division en deux vortex dans un condensat perturbé par un agitateur gaussien, sans rotation.

5. Résolution numérique du modèle de Bogoliubov-de Gennes

Le modèle de Bogoliubov-de Gennes (voir de Gennes (1999)) est utilisé dans de nombreux ouvrages pour analyser la stabilité d'un état stationnaire (Castin and Dum, 1999; Baksmaty et al., 2009; Kevrekidis et al., 2015). Parmi les configurations analysées avec ce formalisme, on peut mentionner Modugno et al. (2003) pour une analyse de la stabilité en 3D d'un vortex central rectiligne. Plus récemment, il a été utilisé par Middelkamp et al. (2010a) pour l'étude de la stabilité en 2D de nombreuses configurations ou par Bisset et al. (2015) pour la stabilité en 3D des vortex en forme d'anneau. Dans ce modèle, on considère des perturbations autour d'un état stationnaire. On linéarise ensuite l'équation de propagation en temps de Gross-Pitaevskii autour de cet état. L'étude des valeurs et vecteurs propres du système linéaire obtenu, et de quantités qui y sont liées, permet de comprendre la stabilité dynamique de l'état stationnaire. Dans ce chapitre, nous commençons par présenter les équations du modèle de Bogoliubov-De Gennes et leur adimensionnement. Ensuite, nous expliquons une méthode numérique utilisée pour calculer les modes de Bogoliubov. Enfin, nous présentons des cas tests de validation de cette méthode numérique. Le but de cette étude est de montrer la flexibilité de notre système numérique qui peut s'adapter facilement à d'autres modèles d'intérêt physique.

5.1. Modèle de Bogoliubov-De Gennes

Nous rappelons dans un premier temps les équations de Gross-Pitaevskii instationnaires et stationnaire avec un nouvel adimensionnement spécifique au modèle de Bogoliubov-de Gennes. Puis, nous retrouvons le système de Bogoliubov-de Gennes en linéarisant l'équation instationnaire autour d'une solution de l'équation stationnaire. Enfin, nous énonçons certaines propriétés attendues des solutions du système.

5.1.1. Linéarisation de l'équation de Gross-Pitaevskii

Reprenons l'équation de Gross-Pitaevskii instationnaire sous sa forme physique (2.1.10) et sans rotation :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V_{\text{trap}}\psi + g|\psi|^2\psi, \tag{5.1.1}$$

où V_{trap} est un potentiel harmonique de la forme :

$$V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}m\left(\omega_x^2x^2 + \omega_y^2y^2 + \omega_z^2z^2\right). \tag{5.1.2}$$

On rappelle que si l'on considère une solution de la forme

$$\psi_S = \phi(\mathbf{x})\exp(-i\mu t/\hbar), \quad \text{où } \mu \text{ est le potentiel chimique,} \tag{5.1.3}$$

on obtient l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi + V_{\text{trap}}\phi + g|\phi|^2\phi = \mu\phi, \quad \phi(\mathbf{x}) \in H_0^1(\mathcal{D}),\, \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d. \tag{5.1.4}$$

Ici, $d \in \{1, 2, 3\}$ est la dimension d'espace. Les états stationnaires méta-stables ou l'état fondamental sont des solutions ϕ du problème aux valeurs et vecteurs propres (5.1.4).

Observons que :

- La norme L^2 de ϕ est la même que celle de ψ_S,

$$\int_{\mathcal{D}} |\psi_S|^2 \, d\mathbf{x} = N \Longrightarrow \int_{\mathcal{D}} |\phi(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x} = N. \tag{5.1.5}$$

- Connaissant ϕ, le potentiel chimique μ peut être obtenue à partir de l'équation (5.1.4) en multipliant des deux côtés de l'équation par ϕ^* et en intégrant :

$$\mu N = \mathcal{E}(\phi) + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} g|\phi|^4 \, dz, \tag{5.1.6}$$

  où

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathcal{D}} \left(\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi|^2 + V_{\text{trap}}\,|\psi|^2 + \frac{1}{2}g|\psi|^4 \right) d\mathbf{x},$$

  est l'énergie du système.

Le modèle de Bogoliubov-de Gennes consiste à linéariser l'équation instationnaire (5.1.1) autour d'une solution $\phi(\mathbf{x}) \in H_0^1(\mathcal{D})$ de l'équation stationnaire (5.1.4). On considère une solution de (5.1.1) sous la forme :

$$\psi(z, t) = \phi \exp(-i\mu t/\hbar) + \exp(-i\mu t/\hbar)\delta\psi \tag{5.1.7}$$

On effectue ensuite les deux calculs intermédiaires

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[(\phi + \delta\psi)\exp(-i\mu t/\hbar)\right] = \left[\mu(\phi + \delta\psi) + i\hbar\frac{\partial\delta\psi}{\partial t}\right]\exp(-i\mu t/\hbar)$$

et

$$|\psi|^2\psi = \left[|\phi|^2 + \phi\delta\psi^* + \phi^*\delta\psi + |\delta\psi|^2\right](\phi + \delta\psi) = |\phi|^2\phi + \phi^2\delta\psi^* + 2|\phi|^2\delta\psi,$$

où les termes en $\delta\psi^2$ ont été négligés.

En prenant en compte que ϕ est une solution stationnaire de (5.1.4), on réécrit (5.1.1) sous la forme :

$$\mu\delta\psi + i\hbar\frac{\partial\delta\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\delta\psi + V_{\text{trap}}\delta\psi + g\left[\phi^2\delta\psi^* + 2|\phi|^2\delta\psi\right]. \tag{5.1.8}$$

On considère ensuite la perturbation $\delta\psi \in H_0^1(\mathcal{D})$ autour de l'état ϕ a la forme :

$$\delta\psi = \left(a(\mathbf{x})e^{-i\omega t} + b^*(\mathbf{x})e^{i\omega^* t}\right), \tag{5.1.9}$$

avec a, b, des fonctions de $H_0^1(\mathcal{D})$. La fréquence complexe $\omega = \omega_r + i\,\omega_i$ va indiquer si la solution est stable ($\omega_i \leq 0$) ou instable ($\omega_i > 0$).

On remplace $\delta\psi$ par son expression (5.1.9) dans l'équation (5.1.8) et on sépare les termes en $e^{-i\omega t}$ et les termes en $e^{i\omega^* t}$ pour obtenir les équations suivantes :

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \mu + V_{\text{trap}} + 2g|\phi|^2\right] a + g\phi^2 b &= \hbar\omega\, a,\\ g(\phi^*)^2 a + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \mu + V_{\text{trap}} + 2g|\phi|^2\right] b &= -\hbar\omega\, b,\end{aligned}$$

On obtient ainsi que a, b et ω sont solutions du système de Bogoliubov-de Gennes :

$$\begin{pmatrix} H - \mu + 2g|\phi|^2 & g\phi^2 \\ g(\phi^*)^2 & H - \mu + 2g|\phi|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix} \tag{5.1.10}$$

où l'opérateur

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{trap}}. \tag{5.1.11}$$

5.1.2. Adimensionnement

Dans les travaux de Middelkamp et al. (2010a), Kevrekidis et al. (2015) et Bisset et al. (2015), ce n'est plus le nombre d'atomes N dans le condensat qui est fixé mais le potentiel chimique μ. En effet, il a été montré dans Pethick and Smith (2002) et Pitaevskii and Stringari (2003) que ces deux quantités sont intimement liées et mesurables expérimentalement. Ainsi, afin de correspondre à ces travaux, nous considérons que le potentiel chimique est un paramètre à donner. Ceci implique que nous utiliserons un nouvel adimensionnement. On ne cherche plus, comme précédemment, à rendre la constante de conservation de la masse N unitaire. Cependant, c'est la constante de non linéarité g qui sera rendue unitaire.

On considère les variables adimensionnées suivantes :

$$\tilde{t} = \frac{t}{(1/\omega_d)}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{a_{\text{ho}}} \text{ où } a_{\text{ho}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_d}}, \quad u = \frac{\psi}{\psi_0} \text{ où } \psi_0 = \left(\frac{g_d}{\hbar\omega_\perp}\right)^{-1/2}, \tag{5.1.12}$$

où on a introduit les variables dépendant de la dimension d'espace $d \in \{1, 2, 3\}$

$$\omega_d = \begin{cases} \omega_\perp, \text{ pour } d = 1 \text{ ou } d = 3, \\ \omega_z, \text{ pour } d = 2, \end{cases} \tag{5.1.13}$$

et

$$g_d = \begin{cases} g_{1d} = 2a_s(\hbar\omega_\perp), \text{ pour } d = 1, \\ g_{2d} = 2\sqrt{2\pi}a_s a_{\text{ho}}\hbar\omega_z, \text{ pour } d = 2, \\ g = \dfrac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}, \text{ pour } d = 3. \end{cases} \tag{5.1.14}$$

Alors, l'équation de propagation en temps réel de Gross-Pitaevskii sans rotation devient :

$$i\frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} = -\frac{1}{2}\Delta u + \tilde{V}_{\text{trap}} u + |u|^2 u, \tag{5.1.15}$$

où :

$$\begin{cases} \tilde{V}_{\text{trap}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \dfrac{1}{2}\left(a_x\tilde{x}^2 + a_y\tilde{y}^2 + a_z\tilde{z}^2\right), \quad a_j = \left(\dfrac{\omega_j}{\omega_\perp}\right)^2, \ j \in \{x,y,z\}, \text{en 3D} \\ \tilde{V}_{\text{trap}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \dfrac{1}{2}\left(a_x\tilde{x}^2 + a_y\tilde{y}^2\right), \quad a_j = \left(\dfrac{\omega_j}{\omega_z}\right)^2, \ j \in \{x,y\}, \text{en 2D} \\ \tilde{V}_{\text{trap}}(\tilde{\mathbf{x}}) = \dfrac{1}{2}\left(a_z\tilde{z}^2\right), \quad a_z = \left(\dfrac{\omega_z}{\omega_\perp}\right)^2, \text{en 1D.} \end{cases} \tag{5.1.16}$$

Le nombre d'atomes dans le condensat devient :

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{\mathcal{D}} |u|^2 \, d\tilde{\mathbf{x}} = \frac{N}{\psi_0^2 a_{\text{ho}}^3} = \frac{4\pi N a_s}{a_{\text{ho}}} \quad \text{en 3D,} \\ \displaystyle\int_{\mathbb{R}^2} |u|^2 \, d\tilde{\mathbf{x}} = \frac{N}{\psi_0^2 a_{\text{ho}}^2} = \frac{2\sqrt{2\pi} N a_s}{a_{\text{ho}}} \quad \text{en 2D,} \\ \displaystyle\int_{\mathcal{D}} |u|^2 \, d\tilde{\mathbf{x}} = \frac{N}{\psi_0^2 a_{\text{ho}}} = \frac{2a_s}{a_{\text{ho}}} \quad \text{en 1D.} \end{cases} \tag{5.1.17}$$

L'énergie adimensionnée s'écrit maintenant :

$$\tilde{E}(u) = \frac{\mathcal{E}(\psi)}{(\hbar\omega_\perp)\psi_0^2 (a_{\text{ho}})^d} = \int_{\mathcal{D}} \left(\frac{1}{2}|\nabla u|^2 + \tilde{V}_{\text{trap}}|u|^2 + \frac{1}{2}|u|^4\right) d\tilde{\mathbf{x}}. \tag{5.1.18}$$

L'expression de la solution stationnaire (5.1.3) devient

$$\tilde{\psi}_S = \tilde{\phi}(\tilde{z}) \exp(-i\tilde{\mu}\tilde{t}), \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu}{\hbar\omega_\perp}, \tag{5.1.19}$$

où $\tilde{\phi}$ est solution de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire adimensionnée :

$$-\frac{1}{2}\Delta\tilde{\phi} + \tilde{V}_{\text{trap}}\tilde{\phi} + |\tilde{\phi}|^2\tilde{\phi} = \tilde{\mu}\tilde{\phi}. \tag{5.1.20}$$

L'expression (5.1.6) donnant le potentiel chimique devient :

$$\left(\int_{\mathcal{D}} |\tilde{\phi}|^2 \, d\tilde{\mathbf{x}}\right) \tilde{\mu} = \tilde{E}(\tilde{\phi}) + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}|\tilde{\phi}|^4 \, d\tilde{\mathbf{x}} = \int_{\mathcal{D}} \left(\frac{1}{2}\left|\nabla\tilde{\phi}\right|^2 + \tilde{V}_{\text{trap}}|\tilde{\phi}|^2 + |\tilde{\phi}|^4\right) d\tilde{\mathbf{x}}. \tag{5.1.21}$$

Pour l'analyse du système de Bogoliubov-de Gennes, on considère dans (5.1.9) les quantités adimensionnées a, b et ω exprimées en unité de $\omega_\perp$ en 3D et en 1D et en unité de ω_z en 2D. On obtient alors le système (5.1.10) adimensionné :

$$\begin{pmatrix} \tilde{H} - \tilde{\mu} + 2|\tilde{\phi}|^2 & \tilde{\phi}^2 \\ (\tilde{\phi}^*)^2 & \tilde{H} - \tilde{\mu} + 2|\tilde{\phi}|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}, \tag{5.1.22}$$

où

$$H = -\frac{1}{2}\Delta + \tilde{V}_{\text{trap}}. \tag{5.1.23}$$

Dans la suite, on omet la notation avec un $\tilde{}$.

5.1.3. Caractéristiques des modes de Bogoliubov

Les valeurs et vecteurs propres du système de Bogoliubov-de Gennes (5.1.22) possèdent plusieurs caractéristiques théoriques que nous souhaiterons vérifier numériquement (voir Frantzeskakis (2010)) :

1. Si l'état stationnaire ϕ est dynamiquement stable, les valeurs propres qui lui sont associées doivent être de partie imaginaire négative.
2. De part la structure hamiltonienne du système, si ω est une valeur propre alors $-\omega$, ω^* et $-\omega^*$ en sont aussi.
3. Dans le cas où l'on considère une valeur propre ω positive, la signature de Krein $K := \int_{\mathcal{D}} \omega \left(|a|^2 - |b|^2\right)$ permet d'étudier certaines propriétés du mode de Bogoliubov (a, b). Tous les modes possèdent une signature de Krein positive dans le cas où l'état stationnaire ϕ est l'état fondamental. Dans le cas contraire, un mode dont la signature de Krein est négative est appelé mode anormal. Ces modes apparaissent quand des excitations topologiques du condensat de Bose-Einstein sont considérées (*i. e.* des solitons noirs ou des vortex). Il deviennent dynamiquement instables s'ils entrent en collision avec un autre mode.

5.2. Méthode de Newton et librairie ARPACK

Afin de résoudre numériquement les équations (5.1.22), (5.1.23) et (5.1.20), nous utilisons le logiciel FreeFem++ et donc une discrétisation spatiale en éléments finis. La première étape est de construire un état stationnaire, solution de l'équation (5.1.20) pour μ fixé. Il n'y a ici plus de contrainte de norme unitaire et nous pouvons utiliser un algorithme de Newton, décrit plus bas, comme cela est le cas dans les travaux de Baksmaty et al. (2009); Bisset et al. (2015). Pour résoudre le problème aux valeurs et vecteurs propres (5.1.22), Baksmaty et al. (2009) utilisent la bibliothèque **SLEPc** (Hernandez et al., 2005) pour une discrétisation de type éléments finis, alors que Middelkamp et al. (2010a); Modugno et al. (2003) utilisent la bibliothèque **Arpack** (R. B. Lehoucq, 1997) pour une discrétisation en espace de type spectrale. Dans ces travaux, nous utilisons **Arpack** interfacé avec FreeFem++.

5.2.1. Construction de l'état stationnaire avec la méthode de Newton

Nous souhaitons résoudre numériquement l'équation non-linéaire (5.1.20) en utilisant l'algorithme de Newton. Pour construire l'algorithme en utilisant une discrétisation spatiale en éléments finis, nous remanions cette équation. Nous séparons sa partie réelle et sa partie imaginaire et l'exprimons sous forme variationnelle. Pour cela, nous définissons les éléments de $H_0^1(D, \mathbb{R})$: $\phi_r := \Re(\phi)$ et $\phi_i := Imag(\phi)$. En remplaçant ensuite ϕ par $\phi_r + i\phi_i$ dans (5.1.20) et en séparant les parties réelles et imaginaires de la fonctionnelle f, on obtient le système d'équations :
Trouver $(\phi_r, \phi_i) \in \left(H_0^1(D, \mathbb{R})\right)^2$ tel que

$$f_r(\phi_r) := -\frac{1}{2}\Delta\phi_r + V_{\text{trap}}\phi_r + (\phi_r^2 + \phi_i^2)\phi_r - \mu\phi_r = 0, \tag{5.2.1}$$

$$f_i(\phi_i) := -\frac{1}{2}\Delta\phi_i + V_{\text{trap}}\phi_i + (\phi_r^2 + \phi_i^2)\phi_i - \mu\phi_i = 0. \tag{5.2.2}$$

Nous l'exprimons ensuite sous forme variationnelle :
Trouver $(u_r, u_i) \in \left(H_0^1(D,\mathbb{R})\right)^2$ tel que pour tout $(v_1, v_2) \in \left(H_0^1(D,\mathbb{R})\right)^2$,

$$F_r(u_r, u_i, v_1) := \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla u_r \cdot \nabla v_1 + V_{\text{trap}} u_r v_1 + (u_r^2 + u_i^2) u_r v_1 - \mu u_r v_1 = 0, \tag{5.2.3}$$

$$F_i(u_r, u_i, v_2) := \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla u_i \cdot \nabla v_2 + V_{\text{trap}} u_i v_2 + (u_r^2 + u_i^2) u_i v_2 - \mu u_i v_2 = 0. \tag{5.2.4}$$

Énonçons maintenant l'algorithme de Newton pour calculer une solution de ce problème variationnel. Supposons que nous avons construit une approximation en éléments finis (u_r^n, u_i^n), dans un certain espace de dimension finie $V_h \subset H_0^1(D,\mathbb{R})$, de (u_r, u_i) à l'étape n. Nous construisons (u_r^{n+1}, u_i^{n+1}) dans V_h^2 en résolvant le système :
Trouver $q = u_r^n - u_r^{n+1}$ et $s = u_i^n - u_i^{n+1}$ tels que pour tout $(v_1, v_2) \in \left(H_0^1(D,\mathbb{R})\right)^2$:

$$\left[\frac{\partial F_r}{\partial u_r}\right]_{u=u^n} .q + \left[\frac{\partial F_r}{\partial u_i}\right]_{u=u^n} .s = F_r(u_r^n, u_i^n, v_1), \tag{5.2.5}$$

$$\left[\frac{\partial F_i}{\partial u_r}\right]_{u=u^n} .q + \left[\frac{\partial F_i}{\partial u_i}\right]_{u=u^n} .s = F_i(u_r^n, u_i^n, v_2). \tag{5.2.6}$$

Sous sa forme variationnelle, ce système d'équations se réécrit :
Trouver $q = u_r^n - u_r^{n+1}$ et $s = u_i^n - u_i^{n+1}$ tels que :

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla q \nabla v_1 + \frac{1}{2} V_{\text{trap}}\, q v_1 + \left[3(u_r^n)^2 + (u_i^n)^2 - \mu\right] q v_1 + \int_{\mathcal{D}} 2 u_i^n u_r^n (s v_1) \\ = & \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla u_r^n \nabla v_1 + \frac{1}{2} V_{\text{trap}}\, u_r^n v_1 + \left[(u_r^n)^2 + (u_i^n)^2 - \mu\right] u_r^n v_1 \end{aligned} \tag{5.2.7}$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla s \nabla v_2 + \frac{1}{2} V_{\text{trap}}\, s v_2 + \left[(u_r^n)^2 + 3(u_i^n)^2 - \mu\right] s v_2 + \int_{\mathcal{D}} 2 u_i^n u_r^n (q v_2) \\ = & \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla u_i^n \nabla v_2 + \frac{1}{2} V_{\text{trap}}\, u_i^n v_2 + \left[(u_r^n)^2 + (u_i^n)^2 - \mu\right] u_i^n v_2 \end{aligned} \tag{5.2.8}$$

Nous arrêtons les itérations lorsque le critère d'arrêt suivant est atteint : $\max(e_E, e_{L_z}) < \varepsilon$, où $e_E = |E^{k+1} - E^k|/E^k$ est l'erreur relative pour l'énergie et $e_{L_z} = |L_z^{k+1} - L_z^k|/L_z^k$ est l'erreur relative pour le moment cinétique. Nous verrons, dans les sections suivantes, des approximations initiales (u_r^0, u_i^0), dépendant du cas test considéré. Nous utilisons le logiciel FreeFem++ (voir Hecht et al. (2007)), pour résoudre ce problème sous forme variationnelle. L'utilisation des éléments finis nous permet de faire appel à une méthode d'adaptation de maillage. Nous pouvons ainsi diminuer les temps de calcul tout en augmentant la précision de la solution numérique. Pour cela, nous utilisons, dans FreeFem++, la fonction *adaptmesh* qui s'appuie sur un contrôle de la métrique basé sur une approximation de la Hessienne de la solution (voir Vallet (1992); Borouchaki et al. (1996); Castro-Diaz et al. (2000); Hecht and Mohammadi (1997); George and Borouchaki (1998) pour plus de détails). Les performances de l'adaptation de maillage, ainsi que de l'algorithme de Newton seront étudiées sur des cas tests dans les sections suivantes du chapitre. Une fois la solution stationnaire obtenue, nous pouvons résoudre le système de Bogoliubov-de Gennes afin d'étudier sa stabilité. Le paragraphe suivant présente une méthode pour le faire avec le logiciel FreeFem++.

5.2.2. Construction des modes de Bogoliubov

Afin de résoudre le système (5.1.22) en utilisant FreeFem++, nous devons tout d'abord l'exprimer sous forme variationnelle :
Trouver $(a, b) \in (H_0^1(\mathcal{D}, \mathbb{C}))^2$ et $w \in \mathbb{C}$ tels que $\forall v = (v_1, v_2) \in (H_0^1(\mathcal{D}, \mathbb{C}))^2$,

$$\int_{\mathcal{D}} \Re \left[\frac{1}{2} \langle \nabla a, \nabla v_1 \rangle + (C_{\text{trap}} + 2C_g |\phi|^2 - \mu) \langle a, v_1 \rangle + \phi^2 \langle b, v_1 \rangle \right] + \tag{5.2.9}$$
$$\int_{\mathcal{D}} \Re \left[-\frac{1}{2} \langle \nabla b, \nabla v_2 \rangle - (C_{\text{trap}} + 2C_g |\phi|^2 - \mu) \langle b, v_2 \rangle - (\phi^*)^2 \langle a, v_2 \rangle \right] = \omega \int_{\mathcal{D}} \Re \left[\langle a, v_1 \rangle + \langle b, v_2 \rangle \right],$$

où $\langle u, v \rangle = uv^*$ est le produit scalaire complexe.
Nous utilisons ensuite la bibliothèque **ARPACK** (R. B. Lehoucq, 1997) interfacée avec FreeFem++ pour résoudre ce problème aux valeurs et vecteurs propres. Pour cela, il suffit de construire avec FreeFem++ la matrice d'éléments finis associée au problème (5.2.9) et de l'intégrer dans la fonction *EigenValue*. Cette dernière appelle alors la bibliothèque Arpack qui renvoie les valeurs et vecteurs propres de la matrice en utilisant une méthode d'Arnoldi.

5.3. Application 1D : soliton noir

Afin de vérifier le bon fonctionnement de notre code de calcul, nous souhaitons retrouver les résultats de Middelkamp et al. (2010a). Dans leurs travaux, on trouve une étude, en 1D, de la stabilité d'un condensat de Bose-Einstein, présentant en son centre un soliton noir. Les soliton noirs sont des solutions non triviales de l'équation de Gross-Pitaevskii qui peuvent être considérées comme de fortes excitations non linéaire de la fonction d'onde (voir Frantzeskakis (2010)). Une caractéristique du soliton noir est qu'il y a un saut de phase lorsqu'on le traverse. Nous souhaitons construire un état stationnaire, présentant en son centre un soliton noir, avec l'algorithme de Newton et résoudre le problème de Bogoliubov-de Gennes avec **ARPACK** afin de retrouver les vecteurs et valeurs propres donnés dans l'article. Pour cela, nous construisons la donnée initiale suivante :

• Nous construisons, tout d'abord, l'approximation de Thomas-Fermi qui réalise le minimum de l'énergie (5.1.2) dont la partie cinétique a été négligée :

$$|\phi_{\text{TF}}|^2 = \left(\mu - \frac{1}{2} a_z z^2 \right)_+ \tag{5.3.1}$$

Pour estimer la taille z_m du domaine $\mathcal{D}$ on calcule le rayon de Thomas-Fermi $z_{\text{TF}} = \sqrt{\frac{2\mu}{a_z}}$ que l'on multiplie par un coefficient : $z_m = 1.2\, z_{\text{TF}}$. Remarquons que le maximum de la densité de Thomas-Fermi est donné par $n_0 = max(|\phi_{\text{TF}}|^2) = \mu$ et

$$\int_{-z_{\text{TF}}}^{z_{\text{TF}}} |\phi_{\text{TF}}|^2 \, dz = \frac{4\sqrt{2}}{3} \frac{\mu^{3/2}}{\sqrt{a_z}}. \tag{5.3.2}$$

• On peut construire une solution de type soliton noir, dont le support est l'approximation de Thomas-Fermi :

$$\phi_{\text{DS}} = \phi_{\text{TF}} \tanh\left(\sqrt{n_0} z\right) = \phi_{\text{TF}} \tanh\left(\sqrt{\mu} z\right). \tag{5.3.3}$$

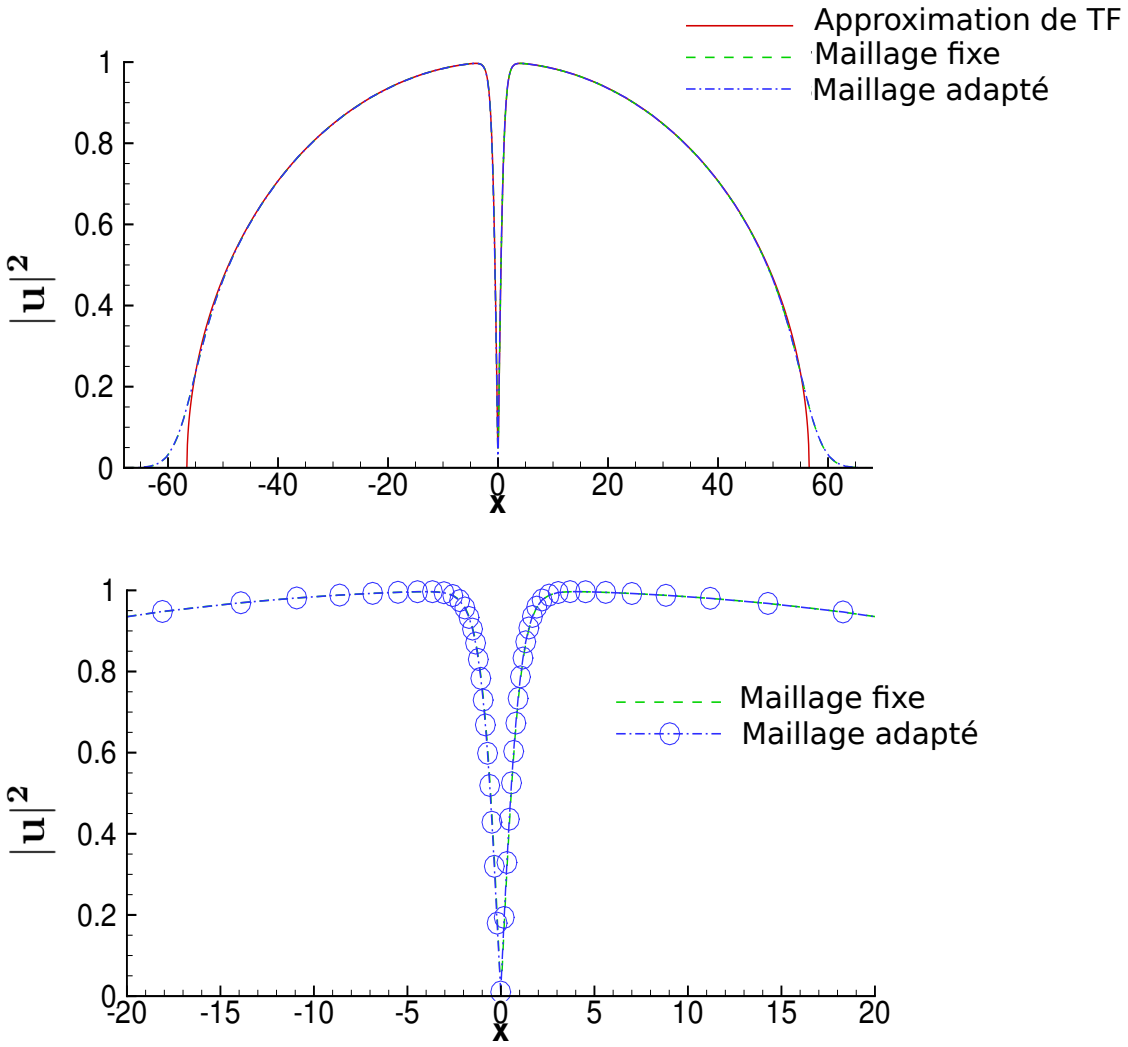


FIGURE 5.1.: Densité de la solution renvoyée par l'algorithme de Newton présentant un soliton noir dans le cas d'un maillage fixe et dans le cas d'un maillage adapté à la solution. Comparaison avec la densité de Thomas-Fermi présentant un soliton noir manufacturé en son centre.

Nous fixons la valeur de $\mu = 1$ et celle de $a_z = 0.025^2$.

Pour une plus grande précision dans les calculs, nous avons utilisé des éléments finis P_2. De plus, deux cas on été considérés, celui d'un maillage fixé au début de l'algorithme de Newton et celui d'un maillage adapté à la solution au fur et à mesure. Nous obtenons les densités tracées sur la figure 5.1. Sur cette figure nous avons, de plus, tracé la densité de l'approximation initiale. Nous constatons que les solution obtenues avec l'algorithme de Newton sont très proches de l'approximation de Thomas-Fermi initiale présentant un soliton noir manufacturé. De plus la précision sur un maillage fixe et sur un maillage adapté semble quasiment la même. Nous avons calculé la masse totale (5.1.17), l'énergie (5.1.2) et le potentiel chimique (5.1.21) de la solution : $\|\phi\|^2 = 73.3828$, $E(\phi) = 44.5810$, $\mu(\phi) = 0.99989$. Nous avons bien retrouvé une solution finale ayant un potentiel chimique égale à la valeur fixée.

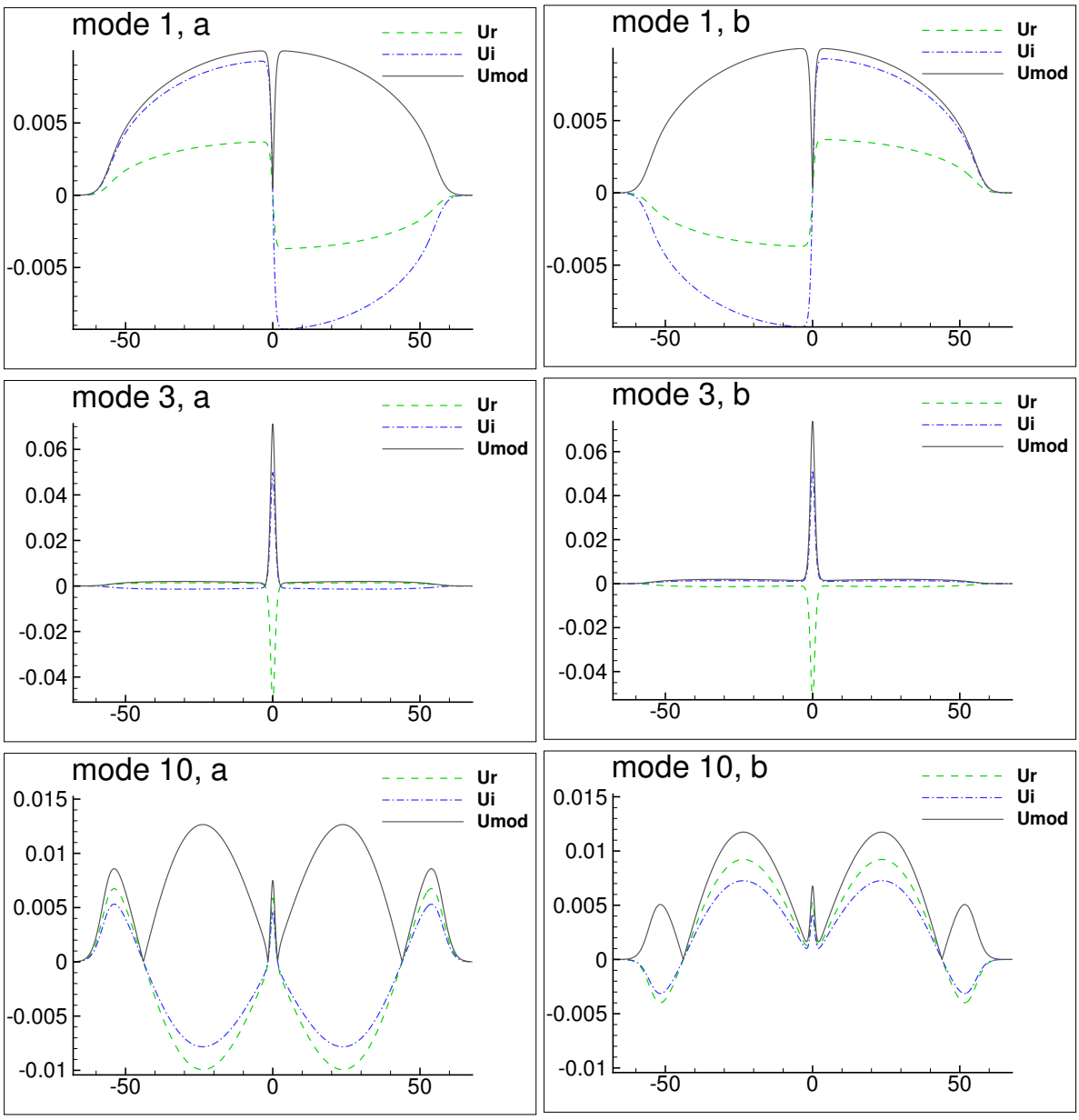


FIGURE 5.2.: Modes de Bogoliubov-de Gennes pour le soliton noir en 1D. Calcul avec un maillage constant. Le mode i correspond à $\omega[i]$ dans les tableaux.

Les valeurs propres du système de Bogoliuov de Gennes, lorsque l'état stationnaire est une approximation de Thomas-Fermi avec un soliton noir, sont connus théoriquement (voir Frantzeskakis (2010)) et correspondent aux fréquences suivantes :

$$\omega = \sqrt{\frac{n(n+1)a_z}{2}}, \quad \text{où n est un entier naturel.} \tag{5.3.4}$$

Ainsi, on s'attend à ce que les valeurs propres retrouvées avec la biliothèque ARPACK soient proches de ces fréquences.

Nous avons tracés sur la figure 5.2 quelques vecteurs propres obtenues.

Le tableau 5.1 présente les valeurs propres trouvées dans la cas d'un maillage fixe et dans le cas d'un maillage adapté.

Valeurs propres trouvées pour le maillage fixe :

$\omega[1]$:	(-2.95117150861e-11, 1.40155140684e-06)
$\omega[2]$:	(2.9510602313e-11, -1.40155141544e-06)
$\omega[3]$:	(0.0178196189801, -7.03387998231e-08)
$\omega[4]$:	(-0.0178198082076, 8.8213284056e-08)
$\omega[5]$:	(0.0249976663026, 4.32176767344e-06)
$\omega[6]$:	(-0.0250016093226, 3.53696477111e-06)
$\omega[7]$:	(-0.0435590301688, 8.84443870212e-06)
$\omega[8]$:	(0.0435508294234, 1.59681718564e-05)
$\omega[9]$:	(-0.0616244815212, 7.81479998426e-06)
$\omega[10]$:	(0.0616185246224, 8.05528782789e-06)

Valeurs propres trouvées pour le maillage adapté :

$\omega[1]$:	(1.30886436457e-05, -6.81557036322e-13)
$\omega[2]$:	(-1.30886436456e-05, 6.81395403593e-13)
$\omega[3]$:	(0.0178580498382, -4.11651320378e-10)
$\omega[4]$:	(-0.0178580504208, -2.25278289033e-10)
$\omega[5]$:	(0.0249986056484, 9.19676831947e-11)
$\omega[6]$:	(-0.0249986056259, 4.88645795938e-12)
$\omega[7]$:	(0.0435554905517, -1.01847677043e-09)
$\omega[8]$:	(-0.0435554906432, 1.69119230139e-10)
$\omega[9]$:	(1.41340550358e-09, 0.0490522423611)
$\omega[10]$:	(1.56532147484e-09, -0.0490522337809)

TABLE 5.1.: Valeurs propres du système de Bogoliuov-de Gennes obtenues avec ARPACK dans le cas d'un soliton noir en 1D pour un maillage fixe et pour un maillage adapté à l'état stationnaire.

On retrouve bien dans nos résultats que si ω est une valeur propre du système alors $-w$ en est une : $\omega[3]$ = - $\omega[4]$; $\omega[5]$=-$\omega[6]$.

$\omega[1]$=$\omega[2]$=0 reflète l'invariance par changement de phase de l'équation de Gross-Pitaevskii en 1D (voir Frantzeskakis (2010)).

$\omega[3] = 0.01785 \approx \sqrt{\frac{a_z}{2}} = 0.017677$ est un mode anormal d'après Frantzeskakis (2010). On s'attend à ce que sa signature de Krein soit négative.

$\omega[5] = 0.02499 \approx \sqrt{a_z}$ est d'après Frantzeskakis (2010) le mode dipolaire ou mode de Kohn, et correspond au mouvement du centre de masse du système. Comme le système est confiné dans un potentiel de piégeage harmonique, le centre de masse oscille selon la fréquence de piégeage $\sqrt{a_z}$.

$\omega[8] = 0.04355 \approx \sqrt{3a_z} = 0.0433$ correspond, d'après Frantzeskakis (2010), au mode quadrupolaire qui est propre à la dimension 1. L'excitation du mode quadrupolaire, induite par une modulation en temps de la force du piégeage, résulte en un comportement de type respiration du condensat dont la taille oscille avec cette fréquence.

$\omega[9]$ et $\omega[10]$ ne sont pas identiques dans nos deux cas de maillage. Cependant, la valeur propre obtenue pour le maillage fixe est pertinente, car correspond à $\omega[9]$=0.06161 $\approx \sqrt{6a_z} = 0.06123$.

Valeurs propres obtenues avec le maillage constant

valeur propre	ω	$K = \int(\lvert a\rvert^2 - \lvert b\rvert^2)dz$
$\omega[2]$:	(2.9510602313e-11, -1.40155141544e-06)	5.47488148295e-13
$\omega[3]$:	(0.0178196189801, -7.03387998231e-08)	-0.000720606029735
$\omega[5]$:	(0.0249976663026, 4.32176767344e-06)	0.00085578335076
$\omega[8]$:	(0.0435508294234, 1.59681718564e-05)	0.00137194538077
$\omega[10]$:	(0.0616185246224, 8.05528782789e-06)	0.0018073489306

TABLE 5.2.: Valeurs propres positives du système de Bogoliubov-de Gennes pour le cas du soliton noir en 1D et leur signature de Krein.

Sur le tableau 5.2, nous indiquons, pour chaque valeur propre positive, la signature de Krein qui lui est associée. On constate que le mode $\omega[3]$ est bien un mode anormal car sa signature de Krein est négative.

5.4. Application en 2D : état avec un vortex simple

En deux dimensions, l'état contenant un vortex simple en son centre est connu et bien étudié, notamment dans Middelkamp et al. (2010a), Middelkamp et al. (2010b) ou Kevrekidis et al. (2015). Nous avons extrait un cas test de ces articles afin de vérifier le bon fonctionnement en 2D de notre méthode de résolution numérique. Nous considérons un potentiel de piégeage isotopique avec $a_x = a_y = a_\perp = 0.2^2$. Dans ce cas, d'après Middelkamp et al. (2010a), un vortex simple existe seulement si le potentiel chimique vérifie $\mu > 2\sqrt{a_\perp}$. Nous faisons donc varié μ entre 0.4 et 3. L'état initial, utilisé dans la méthode de Newton, pour trouver la solution de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire, est construit de la manière suivante :

• On construit l'approximation de Thomas-Fermi, obtenue en négligeant le terme cinétique dans l'énergie (5.1.2) :

$$|\phi_{\text{TF}}|^2 = \left(\mu - \frac{1}{2}a_\perp r^2\right)_+ \tag{5.4.1}$$

On estime ensuite le rayon de Thomas-Fermi, en considérant les points où la densité précédente est nulle : $r_{\text{TF}} = \sqrt{\dfrac{2\mu}{a_\perp}}$. On le multiplie par un coefficient pour obtenir le rayon du domaine de calcul $r_m = 1.2\, r_{\text{TF}}$. On peut remarquer que le maximum de la densité de Thomas-Fermi est $n_0 = max(|\phi_{\text{TF}}|^2) = \mu$ et sa norme L^2 est

$$\int_0^{+\infty}\int_0^{2\pi} |\phi_{\text{TF}}|^2\, r dr d\theta = \frac{\pi}{2}\mu r_{\text{TF}}^2 = \pi\frac{\mu^2}{a_\perp}. \tag{5.4.2}$$

• Par analogie avec le soliton noir en 1D, nous construisons un vortex simple (SV) en multipliant la densité de Thomas-Fermi par la fonction tanh :

$$\phi_{\text{VS}}(r) = \phi_{\text{TF}} \tanh\left(\sqrt{n_0} r\right) = \phi_{\text{TF}} \tanh\left(\sqrt{\mu} r\right). \tag{5.4.3}$$

Nous traçons sur la figure 5.3 l'état stationnaire obtenu avec la méthode de Newton pour $\mu = 3$ et $a_\perp = 0.2^2$, pour un maillage adapté à la solution et pour une maillage fixe. On constate que les deux solutions sont proches de l'approximation de Thomas-Fermi initiale.

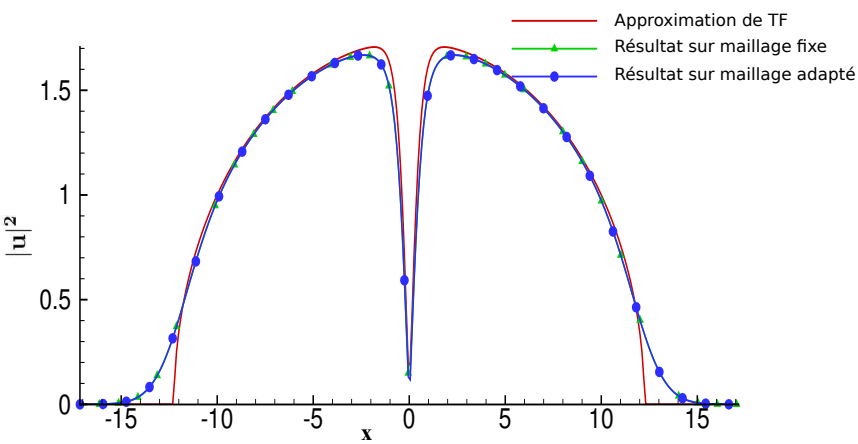


FIGURE 5.3.: $\mu = 3$ and $\Omega = 0.2$ Vortex solution. Adaptive mesh and $|\phi|$.

Nous avons calculé ensuite les 14 premières valeurs propres du système de Bogoliubov avec la librairie ARPACK pour $a_\perp = 0.2^2$ et pour μ variant entre 0.4 et 3.

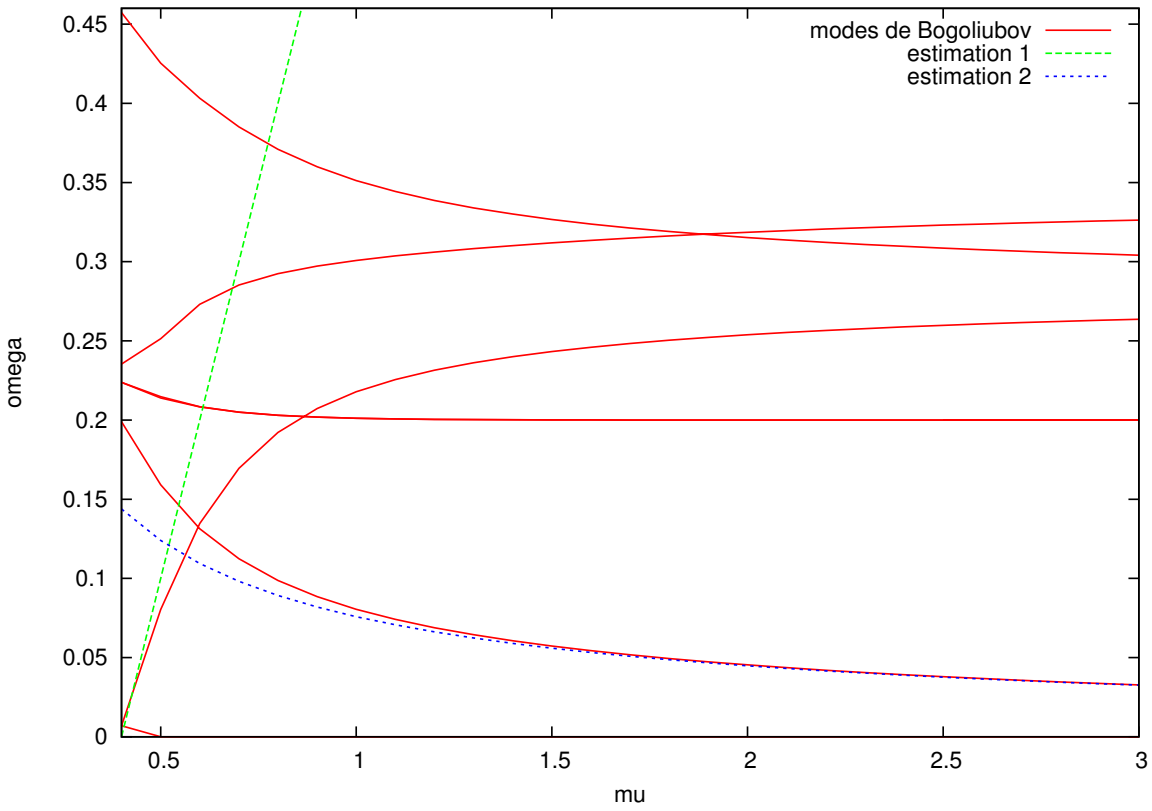


FIGURE 5.4.: Cas 2D d'un état stationnaire avec un vortex simple. Fréquences des modes de Bogoliubov ω en fonction du potentiel chimique pour un piégeage harmonique isotrope avec $a_\perp = 0.2^2$.

Sur la figure 5.4, nous avons tracé l'évolution des 7 valeurs propres positives en fonction de la valeur de μ. Nous avons aussi tracé deux estimations théoriques qui seront précisées dans la suite. Dans le tableau 5.3 on affiche les 7 premières valeurs propres positives obtenues ainsi que leur signature de Krein pour $\mu = 3$ et $a_\perp = 0.2^2$. Pour chaque valeur propre positive, il existe une valeur propre négative de même valeur absolue. Les valeurs propres renvoyés pour un maillage fixe ou pour un maillage adapté sont similaires à 10^{-5} près.

Nous constatons tout d'abord que les valeurs propres sont toutes réelles. Ceci montre que le système est dynamiquement stable.

La première valeur propre est nulle, cela correspond à l'invariance par changement de phase de l'équation de Gross-Pitaevskii (voir Middelkamp et al. (2010b)).

Les valeurs propres 7 et 8, dans le cas du maillage adaptatif, et, 5 et 6, pour le maillage fixe, sont les modes de Kohn. Ils s'agit d'une valeur propre double qui ne dépend pas de μ et est égale à $\sqrt{a_\perp} = 0.2$ d'après Dalfovo et al. (1999). Elle est liée au comportement dipolaire du condensat. Sur la figure 5.4, nous constatons bien que cette valeur propre reste proche de 0.2 dans nos simulations, pour toutes les valeurs de μ fixées.

Valeurs propres pour un maillage adapté

valeur propre	ω	$K = \int(\lvert a\rvert^2 - \lvert b\rvert^2)dz$
2	(1.76254231403e-05 -9.1037356033e-13)	1.20335611101e-05
3	(0.0327689014432 5.60824195918e-11)	-0.226834884877
7	(0.200000610173 6.84902753684e-10)	0.157338172387
8	(0.200000363272 -2.77839664137e-09)	0.229378056474
10	(0.263690175181 3.70790613255e-09)	0.340025455774
13	(0.304136530742 3.57856445489e-09)	0.353667995413
14	(0.326283968953 -3.2165551836e-09)	0.478972426089

Valeurs propres pour un maillage fixe

valeur propre	ω	$K = \int(\lvert a\rvert^2 - \lvert b\rvert^2)dz$
1	(1.00054321203e-12 -6.314997335e-05)	5.85261734903e-13
3	(0.032749492061 2.96483866176e-12)	-0.226843257567
5	(0.200002201582 7.88135868755e-10)	0.186400379764
6	(0.200000832745 1.74048876347e-10)	0.186785313142
9	(0.26368916728 -1.01500266398e-09)	0.340026658931
11	(0.304135001546 4.47476703117e-10)	0.353665452311
12	(0.326281733284 4.59409541406e-10)	0.478973057422

TABLE 5.3.: Cas 2D d'un état stationnaire avec un vortex simple. Modes de Bogoliubov positifs ainsi que leur signature de Krein pour $\mu = 3$ et $a_\perp = 0.2^2$.

La valeur propre 3, dans les deux tableaux, est le mode anormal de signature de Krein négative. Il existe une estimation théorique de sa valeur, développée dans Pelinovsky and Kevrekidis (2008) :

$$\omega_3 \approx \frac{\Omega^2}{2\mu}\log\left(A\frac{\mu}{\Omega}\right) = 0.0326166723852769, \text{ avec } A = 2\sqrt{2}\pi. \tag{5.4.4}$$

Le résultat que nous avons trouvé est proche de cette estimation. Ce mode est lié à la précession du vortex. Le fait que sa signature de Krein soit négative indique qu'il peut entrer en résonance avec un mode de signature de Krein positive. Sur la figure 5.4, nous avons tracé l'estimation théorique (5.4.4) en pointillés, sous le nom "estimation 2". Nous constatons que cette estimation théorique colle très bien à nos résultats quand μ est supérieur à 1. Le mode anormal est proche du mode de Kohn double pour μ petit. A la limite, dite linéaire, quand μ tend vers 0.4, le mode de Kohn est théoriquement une valeur propre d'ordre 4. Puis, lorsque μ augmente, et que l'on tend vers la limite dite de Thomas-Fermi, deux valeurs propres s'éloignent du mode de Kohn. L'une d'entre elles, que l'on distingue clairement sur la figure, augmente avec μ. L'autre, correspondant au mode anormal, diminue quand μ augmente. Tous ces résultats se retrouvent dans Middelkamp et al. (2010b).

La valeur propre 10, dans le cas du maillage adaptatif, et 9, pour le maillage fixe a été décrite dans Kapitula et al. (2016) dans le cas du vortex simple. Sur la figure 5.4, elle est proche de zéro quand μ est égale à 0.4 et augmente avec μ. Quand μ est proche de 0.4, une estimation théorique de cette valeur est donnée dans Kapitula et al. (2016) : $\mu - 2\sqrt{a_\perp}$. Nous avons tracé cette estimation théorique sur la figure 5.4 sous le label "estimation 1". Nous constatons que pour μ tendant vers la limite linéaire, cette estimation semble correcte, mais, lorsque μ grandit, elle ne correspond plus. Ceci est en accord avec les résultats de Kapitula et al. (2016).

Quelques vecteurs propres obtenues pour $\mu = 3$ sont présentés sur la figure 5.5.

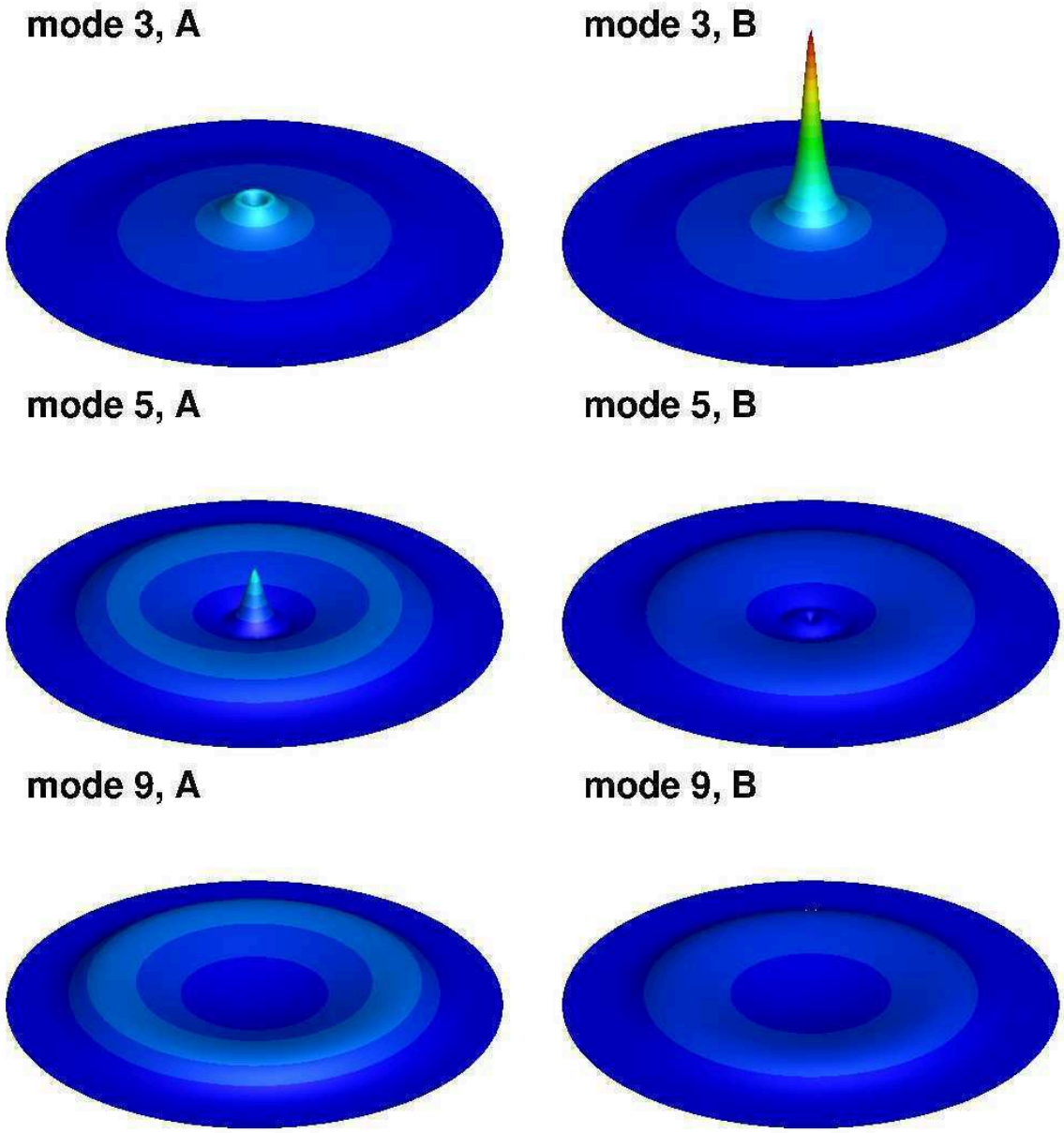


FIGURE 5.5.: Cas 2D d'un état stationnaire avec un vortex simple. Modes de Bogoliubov pour $\mu = 3$ et $\Omega = 0.2$ dans le cas d'un maillage fixe. Le mode i correspond à la valeur propre $\omega[i]$ du tableau 5.3.

5.5. Conclusion

- Le modèle de Bogoliubov-de Gennes (de Gennes, 1999) est utilisé dans la littérature physique pour étudier la stabilité dynamique d'une configuration physique de condensat de Bose-Einstein.

- Le logiciel FreeFem++ nous a permis de programmer une méthode pour résoudre numériquement le problème de Bogoliubov-de Gennes, basée sur une discrétisation en éléments finis :
  1. En utilisant l'algorithme de Newton, nous construisons un état méta-stable, solution de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire, pour une valeur fixée du potentiel chimique μ.
  2. En utilisant la librairie **ARPACK** (R. B. Lehoucq, 1997) et donc une méthode de Arnoldi, nous résolvons le problème aux valeurs et vecteurs propres de Bogoliubov-de Gennes.
- Nous avons testé notre programme sur un cas, en une dimension d'espace, de l'article de Middelkamp et al. (2010a) : un condensat de Bose-Einstein présentant un soliton noir en son centre. En utilisant des maillages fixes, des maillages adaptés à la solution, et une discrétisation spatiale en éléments finis P_2, nous avons obtenus les mêmes résultats que ceux de l'article Middelkamp et al. (2010a). Ceci montre que notre programme fonctionne bien en une dimension d'espace.

- Ensuite, nous avons testé notre programme sur un cas, en deux dimensions d'espace, étudié dans Middelkamp et al. (2010a), Middelkamp et al. (2010b) ou Kevrekidis et al. (2015) : un condensat de Bose-Einstein présentant un vortex simple en son centre. Nous avons utilisé des maillages fixes ou adaptés à la solution et une discrétisation en éléments finis P_2. Nous avons bien retrouvé les résultats présents dans ces articles, ce qui prouve que le programme fonctionne en 2D.

- Dans de futurs travaux, nous souhaitons faire fonctionner ce programme en trois dimensions d'espace. Des cas tests d'état fondamental, en 3D, sans vortex, ou d'état stationnaire, présentant un vortex simple en son centre, sont étudiés dans Bisset et al. (2015). Nous pourrions valider le programme en comparant les résultats obtenus à ceux de cet article. Ensuite, une configuration intéressante à étudier en 3D est un condensat de Bose-Einstein présentant un vortex simple en forme de U ou de S (voir chapitre 3, partie 3.4).

6. Conclusion et perspectives

Nous avons étudié diverses méthodes numériques pour la simulation de condensats de Bose-Einstein. Pour la simulation d'états méta-stables, nous avons résolu numériquement l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire par des méthodes de minimisation directe de l'énergie. Pour simuler l'évolution au cours du temps d'un condensat, nous avons implémenté des méthodes pour la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii instationnaire. Enfin, nous avons étudié la stabilité dynamique d'un état stationnaire par la résolution du système de Bogoliubov-de Gennes. Toutes ces méthodes ont été implémentées dans des codes de calcul basés sur le logiciel FreeFem++.

- Pour la résolution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire avec rotation, nous avons utilisé deux méthodes distinctes. Une méthode de descente basée sur les gradients de Sobolev, développée précédemment dans Danaila and Kazemi (2010) et testée pour des configurations 2D dans Danaila and Hecht (2010) a été améliorée par l'ajout d'une recherche linéaire du pas de descente optimal et étendue à des configurations 3D. Une nouvelle méthode de minimisation basée sur l'utilisation de la librairie Ipopt (Wächter, 2002) a été développée pour des configurations 2D et 3D. En la comparant avec la méthode de gradient de Sobolev, nous avons observé qu'elle est plus efficace pour trouver l'état fondamental à la fois du point de vue du temps de calcul que de la précision. L'utilisation de l'adaptation de maillage proposée dans Danaila and Hecht (2010) pour des configurations 2D a été étendue à des configurations 3D. Ainsi, nous pouvons effectuer des simulations précises avec un temps de calcul réduit. Nous avons ensuite créé une toolbox permettant de lancer facilement ces simulations. Elle présente l'avantage d'être modulable. La modification d'une simple instruction peut, par exemple, permettre de passer d'éléments finis P_1 à des éléments finis de degré plus élevé. De nouvelles méthodes peuvent aisément être intégrées. Une interface utilisateur permet de tester des simulations sur des exemples prédéfinis ou de lancer son propre calcul. Nous avons utilisé cette toolbox pour simuler (en 2D comme en 3D) des états stationnaires présentant de nombreux vortex ou un vortex géant. Une amélioration de cette toolbox est possible en parallélisant les codes ou en incorporant la méthode de gradient conjugué nouvellement développée dans (Danaila and Protas, 2017).

- Pour l'équation d'évolution en temps de Gross-Pitaevskii, deux méthodes de time-splitting combinées à un schéma de Crank-Nicolson (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005) et une méthode de relaxation (Besse, 2004) ont été utilisées. Elles sont habituellement associées à une discrétisation en espace de type spectrale et il est rare qu'une discrétisation en éléments finis soit utilisée. Elles sont inconditionnellement stables, respectent la réversibilité en temps, et la conservation de la masse (Bao and Cai, 2013a; Bao et al., 2013b; Bao and Tang, 2014; Wang, 2005). Cependant, les méthodes de splitting vérifient l'invariance par changement de jauge mais pas la conservation de l'énergie alors que le schéma de relaxation préserve l'énergie mais ne respecte pas l'invariance par changement de jauge. Nous avons vérifié que la méthode de splitting de Lie-Trotter est bien d'ordre un en temps et que les méthodes de splitting de Strang et de relaxation sont

bien d'ordre deux. Sur des cas tests fréquemment simulés en 2D, nous avons montré que l'utilisation d'éléments finis P_2 est souvent nécessaire pour que les méthodes vérifient bien les propriétés de conservation attendues. Nous avons comparé nos méthodes implémentées pour une discrétisation spatiale en éléments finis P_2 avec ces mêmes méthodes construites avec une discrétisation spatiale spectrale et avons trouvé des résultats similaires. Nous les avons donc étendues à des résolutions en 3D. Une toolbox les rassemblant a ensuite été créée. Elle permet à l'utilisateur d'effectuer des simulations en 2D et en 3D, pour des discrétisations spatiales en éléments finis P_1 ou P_2. Une interface permet de lancer des simulations personnalisées ou des exemples prédéfinis. Encore une fois, cette toolbox offre des possibilités diverses. Les potentiels de piégeage, dépendant ou non du temps, peuvent être facilement modifiés. De nouvelles méthodes peuvent rapidement être incorporées. Cette toolbox a servi à la simulation en 2D de condensats en rotation présentant de nombreux vortex ou d'un condensat en 3D présentant un vortex central de charge 2, perturbé par une impulsion. Nous avons incorporé l'adaptation de maillage à ces simulations pour gagner en temps de calcul et en précision. Cependant, les diverses interpolations que cela induit entrainent une perte de masse et d'énergie. Il serait donc intéressant d'étudier comment limiter ces pertes. Encore une fois, une parallélisation du code permettrait aussi d'épargner du temps de calcul.

- Pour étudier la stabilité d'un état stationnaire, nous avons utilisé le modèle de Bogoliubov-de Gennes qui consiste en une linéarisation de l'équation de Gross-Pitaevskii instationnaire autour d'une solution stationnaire. Les valeurs et vecteurs propres de ce système donnent des informations sur la stabilité dynamique du condensat. Nous avons implémenté un schéma de Newton pour construire numériquement l'état stationnaire à potentiel chimique fixé. Puis, nous avons utilisé la librairie Arpack (R. B. Lehoucq, 1997) pour calculer les valeurs et vecteurs propres numériquement. L'utilisation d'éléments finis P_2 a été nécessaire pour atteindre une précision suffisante. Nous avons testé cette méthode en 1D et en 2D sur des exemples connus extraits d'articles de physique. Nous avons ainsi pu vérifier qu'elle fonctionne bien. La suite naturelle de ce travail sera d'étendre ce programme en 3D et d'étudier les condensats de Bose-Einstein présentant un vortex central en forme de U ou de S.

A. Calcul détaillé de l'approximation de Thomas-Fermi (section 3.1.1)

A.1. Forme générale

Dans cette annexe on donne des formules permettant d'obtenir l'approximation de Thomas-Fermi avec différents potentiels de piégeage (quartique ± quadratique). La densité de Thomas-Fermi (3.1.1) peut être réécrite en utilisant (2.3.12) :

$$\rho_{\mathrm{TF}} = |u|^2 = \left(\frac{\rho_0 - 2\tilde{V}^{\mathrm{eff}}}{C_{\mathrm{S}}}\right)_+, \quad \rho_0 = 2\varepsilon\tilde{\mu} = 2\varepsilon\frac{\mu}{\hbar\omega_\perp}, \quad \text{and} \quad C_{\mathrm{S}} = 2\varepsilon^2 C_g. \tag{A.1.1}$$

On rappelle que pour $\varepsilon = 1$ on retrouve l'adimensionnement classique qui utilise la longueur de l'oscillateur harmonique a_{ho} comme échelle caractéristique. La constante ρ_0 est déterminée en imposant la contrainte de norme unitaire (2.3.8). On donne plusieurs formules pour ρ_0 correspondant au potentiel de piégeage effectif (2.3.15). On enlève dans la suite la notation avec un tilde. En plus de ρ_0, on va s'intéresser à la forme globale du condensat et à ses dimensions.

Potentiel harmonique en 2D

Dans ce cas on considère un potentiel de la forme

$$\tilde{V}^{\mathrm{eff}} = \frac{1}{2}\left(a_x x^2 + a_y y^2\right).$$

La contrainte (3.1.2) se réécrit alors :

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{D}} (\rho_0 - a_x x^2 - a_y y^2) dxdy = C_{\mathrm{S}}.$$

On peut calculer $\mathcal{I}$ analytiquement grâce au passage en coordonnées polaires :

$$\begin{cases} x = \frac{r}{\sqrt{a_x}} cos\ t \\ y = \frac{r}{\sqrt{a_y}} sin\ t \end{cases} \quad dxdy = \frac{r}{\sqrt{a_x a_y}} drdt, \ r \in [0, \sqrt{\rho_0}], \ t \in [0, 2\pi],$$

On obtient

$$\mathcal{I} = \frac{1}{\sqrt{a_x a_y}} \int_0^{2\pi} dt \int_0^{\sqrt{\rho_0}} (\rho_0 - r^2) r dr = \frac{\pi \rho_0^2}{2\sqrt{a_x a_y}}.$$

Finalement la constante ρ_0 s'exprime comme :

$$\rho_0 = \sqrt{\frac{2\sqrt{a_x a_y}}{\pi} C_{\mathrm{S}}}.$$

et les dimensions du condensat suivent :

$$R_x = \sqrt{\frac{\rho_0}{a_x}}, \quad R_y = \sqrt{\frac{\rho_0}{a_y}}.$$

Potentiel harmonique en 3D

On refait la même analyse avec le potentiel

$$\tilde{V}^{\text{eff}} = \frac{1}{2}\left(a_x x^2 + a_y y^2 + a_z z^2\right).$$

La contrainte (3.1.2) se réécrit alors :

$$\mathcal{I} = \int_{\mathcal{D}} (\rho_0 - a_x x^2 - a_y y^2 - a_z z^2) dxdydz = C_{\text{S}}.$$

On peut calculer $\mathcal{I}$ analytiquement grâce au passage en coordonnées polaires :

$$\begin{cases} x = \frac{r}{\sqrt{a_x}} sin\ \theta cos\ \phi \\ y = \frac{r}{\sqrt{a_y}} sin\ \theta sin\ \phi \\ z = \frac{r}{\sqrt{a_z}} cos\ \theta \end{cases} \quad dxdydz = \frac{r^2 sin\ \theta}{\sqrt{a_x a_y a_z}} drd\theta d\phi, \quad \begin{cases} r \in [0, \sqrt{\rho_0}], \\ \theta \in [0, \pi], \\ \theta \in [0, 2\pi] \end{cases}$$

On obtient

$$\mathcal{I} = \frac{1}{\sqrt{a_x a_y a_z}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} sin\ \theta d\theta \int_0^{\sqrt{\rho_0}} (\rho_0 - r^2) r dr = \frac{8\pi \rho_0^{5/2}}{15\sqrt{a_x a_y a_z}}.$$

Finalement la constante ρ_0 s'exprime comme :

$$\rho_0 = \left(\frac{15\sqrt{a_x a_y a_z}}{8\pi} C_{\text{S}}\right)^{2/5},$$

et les dimensions du condensat suivent :

$$R_x = \sqrt{\frac{\rho_0}{a_x}}, \quad R_y = \sqrt{\frac{\rho_0}{a_y}}, \quad R_z = \sqrt{\frac{\rho_0}{a_z}}.$$

Potentiel combiné quartique et quadratique en 2D

On considère maintenant que le potentiel de piégeage présente une symétrie radiale ($a_x = a_y = a_2$),

$$\tilde{V}^{\text{eff}} = \frac{1}{2}\left(a_2 r^2 + a_4 r^4\right).$$

Dans ce cas, $a_4 > 0$, mais pour a_2 on peut distinguer deux cas. Si a_2 est positif, on obtient un potentiel quartique+quadratique. Si a_2 est négatif, on obtient un potentiel quartique-quadratique. Le bord du condensat est défini par le rayon R satisfaisant :

$$a_4 R^4 + a_2 R^2 - \rho_0 = 0 \Longrightarrow R_\pm^2 = \frac{-a_2 \pm \sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{2a_4}. \tag{A.1.2}$$

$\boxed{\text{Cas } a_2 \geq 0 : \text{potentiel quartique+quadratique.}}$

On prend dans ce cas $a_2 > 0$ et $a_4 > 0$; on déduit alors de (A.1.2) que $\rho_0 > 0$ et qu'il n'y a qu'une seule racine R_+ :

$$R_+^2 = \frac{-a_2 + \sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{2a_4} > 0.$$

On obtient alors en coordonées polaires :

$$I = 2\pi \int_0^R (\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4) r dr = C_{\mathrm{S}},$$

et donc

$$C_{\mathrm{S}} = 2\pi \left[\rho_0 \frac{R^2}{2} - a_2 \frac{R^4}{4} - a_4 \frac{R^6}{6} \right] = \frac{\pi R^4}{6}(3a_2 + 4a_4 R^2).$$

Ainsi pour calculer $\eta = R^2 > 0$ on calcule (par une méthode de Newton par exemple) la racine de l'équation :

$$4a_4\eta^3 + 3a_2\eta^2 - \underbrace{\frac{6}{\pi}(C_{\mathrm{S}})}_{A_\eta} = 0,$$

et on calcule ensuite

$$\rho_0 = a_2\eta + a_4\eta^2 > 0.$$

Le rayon du condensat est donné par $R = \sqrt{\eta}$.

$\boxed{\text{Cas } a_2 < 0 \text{ : potentiel quartique-quadratique.}}$

On peut distinguer deux cas :

- Si $\rho_0 > 0$, (A.1.2) ne possède qu'une seule racine R_+ et on est ramené au cas précédent. On remarque que ce cas se produit quand :

$$0 < \rho_0 = a_2 R^2 + a_4 R^4 \Longrightarrow \eta = R^2 > \frac{|a_2|}{a_4}.$$

- Si $\rho_0 < 0$, (A.1.2) a deux racines distinctes R_- et R_+ et on effectue l'intégration pour $r \in [R_-, R_+]$, il y a alors un trou au centre du condensat :

$$I = 2\pi \int_{R_-}^{R_+} (\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4) r dr = C_{\mathrm{S}},$$

et donc

$$\frac{C_{\mathrm{S}}}{2\pi} = \left[\frac{\rho_0}{2}(R_+^2 - R_-^2) - \frac{a_2}{4}(R_+^4 - R_-^4) - \frac{a_4}{6}(R_+^6 - R_-^6) \right],$$

or

$$R_+^2 + R_-^2 = -\frac{a_2}{a_4}, \quad R_+^2 R_-^2 = -\frac{\rho_0}{a_4}, \quad R_+^2 - R_-^2 = \frac{\sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{a_4},$$

donc

$$\begin{aligned}
\frac{C_{\mathrm{S}}}{2\pi} &= \frac{\rho_0}{2}(R_+^2 - R_-^2) - \frac{a_4}{4}(R_+^2 - R_-^2)(R_+^2 + R_-^2) - \frac{a_4}{6}(R_+^2 - R_-^2)\left[(R_+^2 + R_-^2)^2 - R_+^2 R_-^2\right] \\
&= \frac{\rho_0}{2}\frac{\sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{a_4} - \frac{a_4}{4}\frac{\sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{a_4}\left(-\frac{a_2}{a_4}\right) - \frac{a_4}{6}\left(\frac{\sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{a_4}\right)\left[\left(-\frac{a_2}{a_4}\right)^2 + \frac{\rho_0}{a_4}\right] \\
&= \frac{\sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{a_4}\left[\frac{\rho_0}{2} + \frac{a_2^2}{4a_4} - \frac{\rho_0}{6} - \frac{a_2^2}{6a_4}\right] \\
&= \frac{\sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{a_4}\left[\frac{\rho_0}{3} + \frac{a_2^2}{12a_4}\right] \\
&= \frac{(a_2^2 + 4\rho_0 a_4)^{3/2}}{12a_4^2}
\end{aligned}$$

et finalement on obtient

$$\rho_0 = \frac{1}{4a_4}\left[\left(\frac{6a_4^2}{\pi}C_{\mathrm{S}}\right)^{2/3} - a_2^2\right] = \frac{1}{4a_4}\left[\left(a_4^2 A_\eta\right)^{2/3} - a_2^2\right].$$

Ce cas arrive quand $\rho_0 < 0$, donc $\left(\frac{6a_4^2}{\pi}C_{\mathrm{S}}\right)^{2/3} < a_2^2$

$$\iff a_4 < \sqrt{\frac{\pi|a_2|^3}{6(C_{\mathrm{S}})}} = \frac{|a_2|^{3/2}}{\sqrt{A_\eta}}.$$

Résumé pour le potentiel combiné quartique et quadratique en 2D

$$\tilde{V}^{\mathrm{eff}} = \frac{1}{2}\left(a_2 r^2 + a_4 r^4\right).$$

$$\begin{array}{l}
\dashrightarrow \text{ construire } \rho_0 \\
\left[\begin{array}{l}
\text{si } a_2 < 0 \text{ et } a_4 < \sqrt{\dfrac{\pi|a_2|^3}{6(C_{\mathrm{S}})}} \\
\rho_0 = \dfrac{1}{4a_4}\left[\left(\dfrac{6a_4^2}{\pi}C_{\mathrm{S}}\right)^{2/3} - a_2^2\right] \\
\text{sinon} \\
\text{calculer la racine } \eta > 0 \text{ de :} \\
f(\eta) = 4a_4\eta^3 + 3a_2\eta^2 - \dfrac{6}{\pi}C_{\mathrm{S}} = 0, \\
\text{et ensuite calculer} \\
\rho_0 = a_2\eta + a_4\eta^2
\end{array}\right. \\
\dashrightarrow \text{ construire le rayon maximal du condensat} \\
R_+ = \left(\dfrac{-a_2 + \sqrt{a_2^2 + a\rho_0 a_4}}{2a_4}\right)^{1/2}.
\end{array}$$

Potentiel combiné quartique et quadratique en 3D.

On considère ici le potentiel

$$\tilde{V}^{\mathrm{eff}} = \frac{1}{2}\left(a_2 r^2 + a_4 r^4 + a_z z^2\right) \text{ avec } a_4 > 0 \text{ et } a_z > 0.$$

On peut exprimer z en fonction de r à l'aide de la formule suivante :

$$a_4 R^4 + a_2 R^2 + a_z z^2 - \rho_0 = 0 \Rightarrow z(r) = \pm\frac{1}{\sqrt{a_z}}(\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4)^{1/2}.$$

En plus de ρ_0 on va s'intéresser au rayon du condensat dans le plan central et à la hauteur maximale du condensat. On traite maintenant plusieurs cas, selon le signe de a_2.

$\boxed{\text{Cas } a_2 > 0 \text{ : potentiel quartique+quadratique.}}$
$a_2 > 0$, $a_4 > 0$ et $a_z > 0$ donc $\rho_0 > 0$ et il existe une unique racine $R_\perp$ qui correspond au rayon du condensat dans le plan central $(z = 0)$:

$$R_\perp^2 = \frac{-a_2 + \sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{2a_4} > 0.$$

En utilisant des coordonnées cylindriques, la symétrie du condensat par rapport au plan $(z = 0)$ et le fait que le rayon dans le plan $(z = 0)$ s'étend de $r = 0$ à $r = R_\perp$ impliquent que :

$$I = \int_{\mathcal{D}} (\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4 - a_z z^2).$$

$$\begin{aligned}
I &= \int_{\mathcal{D}} (\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4 - a_z z^2) \\
&= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{R_\perp} r dr \int_0^{z(r)} 2(\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4 - a_z z^2) dz \\
&= 4\pi \int_0^{R_\perp} \left[z(r)(\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4) - \frac{a_z}{3} z(r)^3 \right] r dr \\
&= 4\pi \int_0^{R_\perp} \left[\frac{1}{\sqrt{a_z}} (\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4)^{3/2} - \frac{1}{3\sqrt{a_z}} (\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4)^{3/2} \right] r dr \\
&= \frac{8\pi}{3\sqrt{a_z}} \int_0^{R_\perp} (\rho_0 - a_2 r^2 - a_4 r^4)^{3/2} r dr.
\end{aligned}$$

que l'on écrit sous la forme :

$$I = \frac{8\pi}{3\sqrt{a_z}} \int_0^{R_\perp} \left[\left(\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4} \right) - \left(\sqrt{a_4} r^2 + \frac{a_2}{\sqrt{4a_4}} \right)^2 \right]^{3/2} r dr. \tag{A.1.3}$$

On a maintenant besoin de faire un calcul intermédiaire pour trouver :

$$J(x) = \int_0^x \left(\lambda^2 - t^2\right)^{3/2} dt, \ \lambda > 0.$$

$$\begin{aligned}
J(x) &= \int_0^x \frac{1}{4} \left(\lambda^2 - t^2\right)^{3/2} dt + \int_0^x \frac{3}{4} \left(\lambda^2 - t^2\right)^{3/2} dt \\
&= \frac{1}{4} x \left(\lambda^2 - x^2\right)^{3/2} + \frac{3}{8} \lambda^2 x \left(\lambda^2 - x^2\right)^{1/2} + \frac{3}{8} \lambda^4 arcsin\left(\frac{x}{\lambda}\right)
\end{aligned}$$

que l'on réécrit :

$$J(x) = \lambda^4 \left[\frac{3}{8} arcsin\left(\frac{x}{\lambda}\right) + \frac{3}{8}\left(\frac{x}{\lambda}\right)\left(1 - \left(\frac{x}{\lambda}\right)^2\right)^{1/2} + \frac{1}{4}\left(\frac{x}{\lambda}\right)\left(1 - \left(\frac{x}{\lambda}\right)^2\right)^{3/2} \right].$$

on note que :

$$J(\lambda) = \frac{3\pi}{16}\lambda^4, \quad J(0) = 0, \quad J(-\lambda) = \frac{-3\pi}{16}\lambda^4.$$

On peut maintenant calculer l'intégrale (A.1.3) en prenant

$$\lambda = \sqrt{\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4}},$$

et en effectuant le changement de variables :

$$u = \sqrt{a_4} r^2 + \frac{a_2}{\sqrt{4a_4}}.$$

$$du = 2\sqrt{a_4} dr, \quad r = 0 \Rightarrow u_0 = \frac{a_2}{\sqrt{4a_4}}, \quad r = R_\perp \Rightarrow u_\perp = \lambda.$$

I devient alors :

$$I = \frac{4\pi}{3\sqrt{a_z a_4}} \int_{u_0}^{\lambda} \left(\lambda^2 - u^2\right)^{3/2} du = \frac{4\pi}{3\sqrt{a_z a_4}} \left[J(\lambda) - J(u_0)\right].$$

Pour simplifier l'écriture on pose :

$$\eta = \frac{a_2}{\sqrt{4a_4\rho_0}} > 0.$$

On obtient :

$$\frac{u_0}{\lambda} = \frac{a_2}{\sqrt{4a_4\rho_0 + a_2^2}} = \frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}.$$

et

$$\lambda^4 = \left(\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4}\right)^2 = \rho_0^2 \left(1+\eta^2\right)^2 = \frac{a_2^4}{(4a_4)^2} \frac{\left(1+\eta^2\right)^2}{\eta^4}.$$

On recalcule alors I :

$$\begin{aligned} I = \frac{4\pi}{3\sqrt{a_z a_4}} \lambda^4 \Bigg[& \frac{3}{8}\left(\frac{\pi}{2} - arcsin\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right)\right) \\ & -\frac{3}{8}\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{1+\eta^2}}\right) - \frac{1}{4}\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right)\left(\frac{1}{(1+\eta^2)^{3/2}}\right)\Bigg] \\ = \frac{\pi a_2^4}{\sqrt{a_z}(4a_4)^{5/2}} \frac{1}{\eta^4} & \left[\left(1+\eta^2\right)^2 arccos\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right) - \eta^3 - \frac{5}{3}\eta\right]. \end{aligned}$$

On cherche maintenant à résoudre l'équation non linéaire en $\eta > 0$: $I - C_\mathrm{S} = 0$
Cela revient à chercher $\eta > 0$ tel que $f(\eta) = 0$ où :

$$f(\eta) = \underbrace{\frac{\sqrt{a_z}(4a_4)^{5/2} C_\mathrm{S}}{\pi a_2^4}}_{A_\eta} \eta^4 + \eta^3 + \frac{5}{3}\eta - \left(1+\eta^2\right)^2 arccos\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right).$$

$$f'(\eta) = 4A_\eta \eta^3 - 4\eta(1+\eta^2) arccos\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right) + \sqrt{1+\eta^2} + 2\eta^2 + \frac{5}{3}$$

On peut trouver η par une méthode de Newton, par exemple.
On construit alors :

$$\rho_0 = \frac{a_2^2}{4a_4\eta^2},$$

et

$$R_\perp^2 = \frac{-a_2 + \sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{2a_4} \text{ et } R_{z_{max}} = z|_{r=0} = \left(\frac{\rho_0}{a_z}\right)^{1/2}.$$

$\boxed{\text{Cas } a_2 = 0 \text{ : potentiel purement quartique.}}$
Ce cas est similaire au précédent avec $a_2 = 0$. On obtient alors $u_0 = 0$, $\lambda = \sqrt{\rho_0}$ et $R_\perp = \left(\frac{\rho_0}{a_4}\right)^{1/4}$.

$$I = \frac{4\pi}{3\sqrt{a_z a_4}}\left(J(\lambda) - J(0)\right) = \frac{4\pi}{3\sqrt{a_z a_4}}\frac{3\pi}{16}\lambda^4 = \frac{\pi^2\rho_0^2}{4\sqrt{a_z a_4}}$$

On obtient :

$$\rho_0 = \frac{1}{\pi}\left(2a_z^{1/2}(4a_4)^{1/2}\right)^{1/2} C_{\mathrm{S}}^{1/2}.$$

et

$$R_\perp = \left(\frac{\rho_0}{a_4}\right)^{1/4} \text{ et } R_{z_{max}} = z|_{r=0} = \left(\frac{\rho_0}{a_z}\right)^{1/2}.$$

$\boxed{\text{Cas } a_2 < 0 \text{ : potentiel quartique}-\text{quadratique.}}$
On est dans le cas où $a_2 < 0$, $a_4 > 0$ et $a_z > 0$

- Si $\rho_0 < 0$, le condensat possède un trou vertical en son centre car on trouve qu'il y a deux racines $R_\perp^\pm$

$$(R_\perp^\pm)^2 = \frac{-a_2 \pm \sqrt{a_2^2 + 4\rho_0 a_4}}{2a_4} > 0.$$

  Le condensat s'étend donc sur le plan central de $R_\perp^-$ à $R_\perp^+$.

$$I = \frac{8\pi}{3\sqrt{a_z}}\int_{R_\perp^-}^{R_\perp^+}\left[\left(\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4}\right) - \left(\sqrt{a_4}r^2 + \frac{a_2}{\sqrt{4a_4}}\right)^2\right]^{3/2} r dr.$$

  On reprend $\lambda = \sqrt{\left(\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4}\right)}$ et on effectue le changement de variables $u = \sqrt{a_4}r^2 + \frac{a_2}{\sqrt{4a_4}}$.
  Quand r varie de $R_\perp^-$ à $R_\perp^+$, u varie de $-\lambda$ à λ. Donc I devient

$$I = \frac{8\pi}{3\sqrt{a_z}}\left(J(\lambda) - J(-\lambda)\right) = \frac{\pi^2}{2\sqrt{a_z a_4}}\lambda^4.$$

$$I = C_{\mathrm{S}} = \frac{\pi^2}{2\sqrt{a_z a_4}}\left(\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4}\right)^2$$

  Ainsi on trouve

$$\rho_0 = \frac{a_z^{1/4}(4a_4)^{1/4}}{\pi}C_{\mathrm{S}}^{1/2} - \frac{a_2^2}{4a_4} = \frac{a_2^2}{4a_4}(\xi - 1)$$

  avec

$$\xi = \frac{a_z^{1/4}(4a_4)^{5/4}}{\pi a_2^2}C_{\mathrm{S}}^{1/2} = \frac{\sqrt{A_\eta}}{\sqrt{\pi}}.$$

  Ce cas est obtenu quand $\frac{\sqrt{A_\eta}}{\sqrt{\pi}} < 1$. On trouve alors

$$R_{max}^2 = \frac{-a_2 + \sqrt{a_2^2 + a\rho_0 a_4}}{2a_4} \text{ et } R_{z_{max}} = z|_{r^2 = \frac{-a_2}{2a_4}} = \frac{1}{\sqrt{a_z}}\sqrt{\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4}}.$$

– Si $\rho_0 > 0$, le condensat présente une déflation en $z = 0$ (le profil de densité ne possède plus de maximum en $z = 0$) Ce cas se produit quand

$$\xi = \frac{a_z^{1/4}(4a_4)^{5/4}}{\pi a_2^2} C_{\mathrm{S}}^{1/2} = \frac{\sqrt{A_\eta}}{\sqrt{\pi}} > 1.$$

On est ramené au cas du potentiel quartique+quadratique à la différence que $\eta < 0$. En particulier :

$$R_{z_{max}} = \frac{1}{\sqrt{a_z}} \sqrt{\rho_0 + \frac{a_2^2}{4a_4}}.$$

Résumé pour le potentiel combiné quartique et quadratique en 3D

$$\tilde{V}^{\mathrm{eff}} = \frac{1}{2}\left(a_2 r^2 + a_4 r^4 + a_z z^2\right).$$

- si $a_2 = 0$,

$$\begin{cases} \rho_0 = \frac{1}{\pi}\left(2a_z^{1/2}(4a_4)^{1/2}\right)^{1/2} C_{\mathrm{S}}^{1/2}. \\ R_\perp = \left(\frac{\rho_0}{a_4}\right)^{1/4} \text{ et } R_{z_{max}} = \left(\frac{\rho_0}{a_z}\right)^{1/2}. \end{cases}$$

- sinon

--→ construire

$A_\eta = \frac{\sqrt{a_z}(4a_4)^{5/2} C_{\mathrm{S}}}{\pi a_2^4}$

--→ créer la fonction

$f(\eta) = A_\eta \eta^4 + \eta^3 + \frac{5}{3}\eta - \left(1+\eta^2\right)^2 arccos\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right).$

  - si $a_2 > 0$,

  --→ trouver la racine positive $\eta \in [0, 200]$ de $f(\eta) = 0$

  $$\begin{cases} \rho_0 = \frac{a_2^2}{4a_4\eta^2}, \\ R_{max} = \left(\frac{-a_2+\sqrt{a_2^2+4\rho_0 a_4}}{2a_4}\right)^{1/2} \text{ et } R_{z_{max}} = \left(\frac{\rho_0}{a_z}\right)^{1/2}. \end{cases}$$

  - sinon

  $\xi = \frac{\sqrt{A_\eta}}{\sqrt{\pi}}$,

    - si $\xi < 1$,

    $$\begin{cases} \rho_0 = \frac{a_2^2}{4a_4}(\xi - 1), \\ R_{max} = \left(\frac{-a_2+\sqrt{a_2^2+4\rho_0 a_4}}{2a_4}\right)^{1/2} \text{ et } R_{z_{max}} = \left(\frac{\rho_0}{a_z} + \frac{a_2^2}{4a_4 a_z}\right)^{1/2}. \end{cases}$$

    - sinon

    --→ trouver la racine négative $\eta \in [-200, 0]$ de $f(\eta) = 0$

    $$\begin{cases} \rho_0 = \frac{a_2^2}{4a_4\eta^2}, \\ R_{max} = \left(\frac{-a_2+\sqrt{a_2^2+4\rho_0 a_4}}{2a_4}\right)^{1/2} \text{ et } R_{z_{max}} = \left(\frac{\rho_0}{a_z} + \frac{a_2^2}{4a_4 a_z}\right)^{1/2}. \end{cases}$$

B. Construction d'un maillage ellipsoïdal en 3D avec FreeFem++

Afin d'obtenir un maillage qui corresponde au mieux à la forme allongée du condensat de Bose-Einstein en 3D, nous souhaitons construire un maillage ellipsoïdal avec le logiciel FreeFem++ (Hecht et al., 2007). L'icosaèdre est le polytope régulier qui approche au mieux une sphere, nous utiliserons donc ce polyèdre comme base de maillage de surface que nous déformerons en un ellipsoïde. Les dimensions de ce maillage sont donnés par l'approximation de Thomas-Fermi (voir la section 3.1). Tout d'abord, nous construisons le maillage surfacique d'un icosaèdre (polyèdre à vingt faces triangulaires) d'arête de longueur 1. Puis, nous projetons les coordonnés de ce maillage sur l'ellipsoïde dont les longueurs des axes sont prédéterminées. Enfin, nous utilisons la bibliothèque **TetGen** (Hang, 2015), fournie avec FreeFem++, pour construire les tétraèdres internes au maillage.

1. **Construction de l'icosaèdre**
   Afin de réaliser la surface d'un icosaèdre, nous commençons par construire l'une de

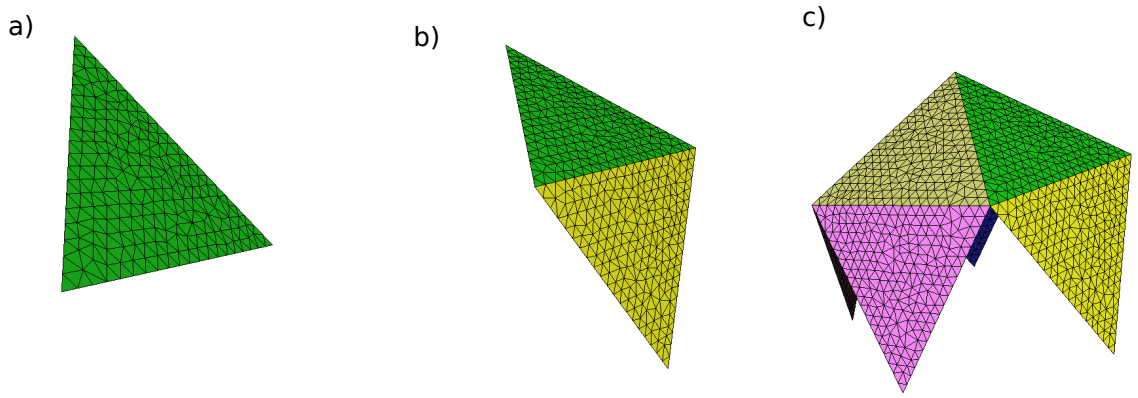


FIGURE B.1.: 3 étapes de construction d'un demi-icosaèdre avec FreeFem++.

ses faces, un triangle équilatéral de coté 1. Nous créons d'abord un maillage 2D du triangle. Puis, nous le transformons en maillage 3D que nous positionnons verticalement, en utilisant la fonction *movemesh23* de FreeFem++ :

```
border a(t=0,1){x=t;y=0;label =1;};
border b(t=1,0.5){x=t;y=sqrt(3)*(1-t);label =2;};
border c(t=0.5,0){x=t;y=sqrt(3)*(t);label=3;};
mesh Triangle=buildmesh(a(np)+b(np)+c(np));
mesh3 Triangle3=movemesh23(Triangle,transfo=[x,0,y]);
```

Nous avons calculé l'angle entre une face d'une pyramide pentagonale et l'horizontale. Nous inclinons, de cet angle, le triangle construit et obtenons le maillage tracé sur la figure B.1.a :

```
real cosico = sqrt(25.+10.*sqrt(5.))/5./sqrt(3.);
real sinico = sqrt(1-square(cosico));
func f1 = sinico*y+cosico*z;
func f2 = -cosico*y+sinico*z;
mesh3 TriangleS = movemesh3(Triangle3,transfo=[x,f1,f2]);
```

Puis, nous construisons le triangle obtenu par rotation de notre premier triangle, autour de son arête inférieure, d'angle dièdre de l'icosaèdre, et obtenons le maillage tracé sur la figure B.1.b :

```
real cosdiedre = sqrt(5)/3; //angle diedre de l'icosaedre -pi/2
real sindiedre = 2./3; //angle diedre de l'icosaedre -pi/2
func f1 = -cosdiedre*y+sindiedre*z;
func f2 = -sindiedre*y-cosdiedre*z;
mesh3 TriangleI = movemesh3(TriangleS,transfo=[x,f1,f2],orientation=-orientation);
mesh3 Triangles = TriangleI+TriangleS;
```

Après avoir positionné le maillage de la figure B.1.b sur le bord d'un pentagone de coté 1 centré en (0,0,0), nous effectuons 5 rotations de ce maillage, autour de l'axe vertical, d'un angle $\frac{2\pi}{5}$, pour construire un demi icosaèdre, illustré par la figure B.1.c :

```
//translation pour que la figure soit sur le bord du pentagone
mesh3 T1 = movemesh3(Triangles,transfo=[x-0.5,y-sinpi3*cosico,z]);
//cinq rotations de la figure
real sin2pi5 = sqrt(10+2*sqrt(5))/4;
real cos2pi5 = (sqrt(5)-1)/4;
mesh3 T2 = movemesh3(T1,transfo=[cos2pi5*x-sin2pi5*y,sin2pi5*x+cos2pi5*y,z]);
mesh3 T3 = movemesh3(T2,transfo=[cos2pi5*x-sin2pi5*y,sin2pi5*x+cos2pi5*y,z]);
mesh3 T4 = movemesh3(T3,transfo=[cos2pi5*x-sin2pi5*y,sin2pi5*x+cos2pi5*y,z]);
mesh3 T5 = movemesh3(T4,transfo=[cos2pi5*x-sin2pi5*y,sin2pi5*x+cos2pi5*y,z]);
mesh3 Tdemi= T1+T2+T3+T4+T5;//moitié de l'icosaedre
```

Enfin, nous translatons le demi icosaèdre, vers le haut, de la moitié de la hauteur d'un prisme d'ordre 5. Nous construisons ensuite son symétrique par rapport au plan $(z = 0)$ pour obtenir la moitié inférieure de l'icosaèdre. Après avoir effectué une rotation de $\frac{\pi}{5}$ de cette moitié inférieure, nous construisons l'icosaèdre entier en emboitant les deux moitiés. On obtiens ainsi le maillage surfacique de la figure B.2.a :

```
real h = 0.5*sqrt(3-square(tanpi10));//hauteur du prisme d'ordre 5;
mesh3 Tdemi0 = movemesh3(Tdemi,transfo=[x,y,z+0.5*h]);//moitié supérieure
mesh3 Tdemi1 = movemesh3(Tdemi0,transfo=[x,y,-z]);//moitié inférieure
//rotation de la moitié inférieure pour emboiter les deux moitiés :
real sinpi5 = cos3pi10;
real cospi5 = sin3pi10;
mesh3 Tdemi1rot = movemesh3(Tdemi1,transfo=[cospi5*x-sinpi5*y,sinpi5*x+cospi5*y,z]);
mesh3 Ticosaedre = Tdemi0+Tdemi1rot;
```

2. **Construction de l'ellipsoïde**
   On souhaite construire l'ellipsoïde de demi-longueurs α, β, γ selon l'axe des x, y, z. Nous construisons le maillage issu de la projection de chaque point de l'icosaèdre sur la surface de l'ellipsoïde :

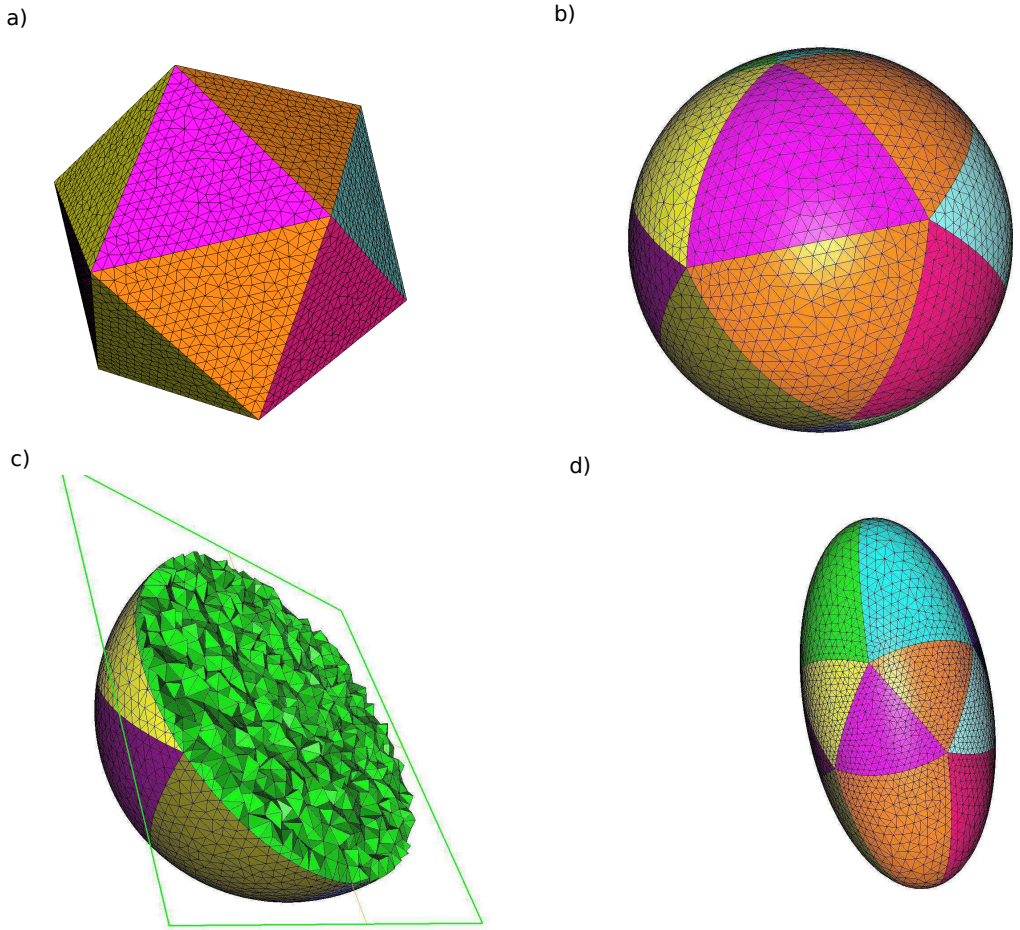


FIGURE B.2.: Étapes de construction d'un maillage ellipsoïdal à partir d'un icosaèdre avec FreeFem++.

```
real aa =square(1./alpha), bb=square(1./beta), cc =square(1./gamma);
func metric = sqrt(aa*x*x+bb*y*y+cc*z*z);
mesh3 Th = movemesh3(Ticosaedre,transfo=[x/metric,y/metric,z/metric]);
```

Nous obtenons ainsi pour $\alpha = \beta = \gamma = 1$, le maillage d'une sphère (figure B.2.b) et, pour $\alpha = \beta = 0.5$ et $\gamma = 1$, le maillage ellipsoïdal (figure B.2.d).
Ensuite, nous effectuons un raffinement du maillage surfacique obtenu, en utilisant la librairie **freeyams** (Frey, 2001b), fournie dans FreeFem++, afin de définir la taille de maille souhaitée et d'uniformiser le maillage.

```
real hminsurf = 0.3;
Th =freeyams(Th,metric,hmin=hminsurf,hmax=hminsurf,gradation=1.1);
```

Enfin, nous utilisons la librairie **TetGen** (Hang, 2015), fournie avec FreeFem++, pour construire les tétraèdres internes au maillage, avec une taille d'arête définie :

```
real hminvol = 0.6;
real[int] domain = [0.,0.,0.,1,hminvol*hminvol*hminvol/6];
Th3fin=tetg(Th,switch="paAAQYY",nbofregions=1,regionlist=domain);
```

On obtient ainsi le maillage, constitué de tétraèdres, d'une sphère (figure B.2.c) ou d'un ellipsoïde (figure B.2.d).

C. Description de la toolbox GPFEM

Tous les fichiers sont fournis dans un dossier nommé *BEC_$\mathcal{X}$D_ ToolBox_ FreeFem* où $\mathcal{X}$ désigne ici la dimension deux ou trois. Ce dossier contient :

1. Le fichier *BEC_$\mathcal{X}$D_ ToolBox.edp* contient le code principal.
2. Le dossier *Input* dans lequel deux fichiers permettent à l'utilisateur de choisir les paramètres d'entrée :
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ physic_ param.dat* contient les paramètres permettant d'identifier la configuration physique.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ run_ param.dat* contient des paramètres pour choisir différentes options de construction de la solution.
3. Le dossier *Include* contient 9 fichiers :
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ Macros.idp* contient toutes les fonctions et macros utiles.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ comput_ param.idp* lit les fichiers de paramètres d'entrée et construit les constantes informatiques.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ comput_ init_ condition.idp* construit une approximation initiale en utilisant soit Ipopt soit Thomas-Fermi.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ Ipoptaxi_ init.idp* construit comme approximation initiale la solution axisymétrique en dimension $(\mathcal{X}-1)$ avec Ipopt.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ Ipopt_ init.idp* contient le code qui utilise Ipopt en dimension $\mathcal{X}$ pour construire une approximation sans rotation.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ GradS_ method.idp* résout le problème principal avec la méthode de gradient de Sobolev.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ Ipopt_ method.idp* résout le problème principal avec Ipopt.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ plot_ energ.idp* crée un fichier de code lisible par gnuplot et lance gnuplot pour tracer l'énergie et d'autres quantités pertinentes pendant le calcul.
   - *BEC_ 2D_ results.idp* compte, en 2D, le nombres de vortex présents dans la solution et donne leur position.
4. Le dossier *Examples*. En 2D, ce dossier contient 8 exemples de fichiers d'entrée qui peuvent être utilisés pour lancer différents cas test en choisissant entre deux adimensionnements, deux potentiels et deux méthodes de résolution. Pour lancer l'un de ces cas tests on peut, par exemple, taper dans un terminal la ligne de commande :
   FreeFem++ *BEC_$\mathcal{X}$D_ ToolBox.edp*
   -run *Examples/GradS_ Harm_ run_ param.dat*
   -param *Examples/AR_ Harm_ physic_ param.dat.*
   Cette commande exécutera le programme pour un potentiel harmonique prédéfini, en utilisant l'adimensionnement d'Aftalion-Rivière et la méthode de gradient de Sobolev. En 3D, ce dossier contient 6 fichiers pour lancer des exemples de calcul d'un vortex en forme de S ou de U, utilisant la méthode de gradient de Sobolev ou Ipopt. Une description plus précise de ces exemples se trouve dans la section 3.4.2.
5. Le dossier *GLUT* qui contient un code C++ qui peut être compilé pour générer une interface utilisateur avec GLUT.
6. Un fichier makefile pour compiler le code source de l'interface et un fichier README.

Paramètres d'entrée

Concentrons nous maintenant sur la description des paramètres d'entrée. Ils sont répartis dans deux fichiers. Les commentaires peuvent être insérées dans ces fichiers en les précédant du symbole // usuel en C++. Les mots-clefs permettant de définir les paramètres doivent être précédés du symbole @. Pour entrer un paramètre il suffit d'écrire sa valeur après le mot-clef correspondant. Si un mot-clef n'est pas écrit dans un fichier alors une valeur par défaut est attribuée au paramètre correspondant. Cependant, certains paramètres sont nécessaires et l'absence du mot-clef correspondant générera un message d'erreur. Par défaut, l'utilisateur doit modifier les fichiers fournis dans le dossier *Input*. Néanmoins, n'importe quel fichier d'entrée peut être pris en compte en entrant dans un terminal la ligne de commande suivante :
FreeFem++ *BEC_$\mathcal{X}$D_ ToolBox.edp* -param *name_ physics* -run *name_ run*.
Ici, *name_ physics* désigne le nom du fichier que l'utilisateur veut prendre en compte et contenant des paramètres physiques et *name_ run* est celui contenant les paramètres numériques contrôlant la construction de la solution.

1/ Le premier fichier que l'on trouve dans le dossier *Input*, *BEC_$\mathcal{X}$D_ physic_ param.dat*, contient les paramètres physiques :

- @scaling, une chaîne de caractères qui peut prendre les valeurs *AR* ou *Classical* selon l'adimensionnement choisi. Une valeur doit être donnée pour ce paramètre.
- @kind, un booléen qui prend la valeur 0 si on souhaite entrer des constantes mathématiques adimensionnées telles que celles des formules (2.3.5), (2.3.6) et (2.3.16), ou la valeur 1 si on veut entrer les paramètres physiques correspondants. Ce paramètre doit être fixé.
- Si la valeur 0 a été fixée pour le paramètre @kind, une valeur réelle doit être donnée aux paramètres suivants :
  @beta ($=\beta$), le coefficient devant le terme non linéaire de l'équation (voir 2.3.5),
  @Omop ($=\frac{\Omega}{\omega_\perp}$), le coefficient du moment angulaire (voir 2.3.6),
  @ax, @ay, @az and @a4 sont les coefficients dans le potentiel de piégeage V_{trap} (voir 2.3.16).
- Si la valeur 1 a été fixé pour @kind, on doit donner une valeur réelle aux paramètres suivants :
  @N, le nombre d'atomes,
  @m, la masse atomique,
  @as, la longueur de diffusion,
  @Omega ($=\Omega$), la vitesse de rotation,
  @omegax ($=\omega_x$), @omegay ($=\omega_y$), omegaz ($=\omega_z$), @omega2 ($=\omega_2$), @omega4 ($=\omega_4$),
  @U2 et @U4 sont les coefficients V_{trap} (voir 2.3.14).

2/ Le second fichier, *BEC_$\mathcal{X}$D_ run_ param.dat* contient les paramètres informatiques :

1. Voici, tout d'abord, les paramètres qui doivent être entrés et ne prennent pas de valeur par défaut :
   - @method est une chaîne de caractères pour choisir la méthode de résolution du problème. Les valeurs possibles sont *Ipopt* ou *GradS*.
   - @EPS0 est un réel correspondant à l'erreur d'approximation finale à atteindre.
   - @init est une chaîne de caractères qui permet de choisir quelle approximation initiale on souhaite construire. Elle peut prendre les valeurs *TF* (Thomas Fermi), Ipoptaxi (approximation axisymétrique) ou Ipoptnorot (sans rotation).

   Les paramètres suivants possèdent une valeur par défaut et peuvent donc être omis dans le fichier de paramètres :
   - @GradSMaxIter est le nombre maximum d'itérations pour la méthode de gradient de Sobolev. Valeur par défaut : 8000.

- @IpoptMaxIter est le nombre maximum d'itération que peut effectuer Ipopt entre deux adaptations de maillage. Valeur par défaut : 50.

2. Les paramètres suivants contrôlent les données de sortie renvoyés par le programme :
   - @dircase est un préfixe du nom du dossier qui contiendra les fichiers écrits par le programme. La forme du potentiel, ainsi que le nom de la méthode de résolution utilisée seront rajoutés à ce nom. Valeur par défaut : BEC_3D.
   - @scase est un préfixe pour le nom des fichiers de sortie. La valeur de $\frac{\Omega}{\omega_\perp}$ et celle de C_g sont automatiquement ajoutés à ce nom. Valeur par défaut : BEC_3D.
   - @withplot est un booléen contrôlant la possibilité de tracer la solution pendant que le programme tourne, avec l'outil de visualisation usuel de FreeFem++. Valeur par défaut : 1.
   - @savesol est un booléen pour contrôler la possibilité de sauvegarder la solution au fur et à mesure qu'elle est construite. Valeur par défaut : 1.
   - @IWAIT est un booléen pour attendre après chaque tracé de la solution. Valeur par défaut : 0.
   - @meditplot est un booléen contrôlant la possibilité de tracer la solution avec medit. Valeur par défaut : 0.
   - @output est une chaîne de caractères qui prend la valeur *vtk* ou *tecplot* pour définir le format des fichiers de sortie. Valeur par défaut : *tecplot*.
   - @ITERSAVE, @ITERNORM et @ITERPLOT sont des entiers correspondant à la fréquence d'itération à laquelle on souhaite sauvegarder, normaliser ou respectivement tracer la solution pendant que le méthode de gradient de Sobolev tourne. Valeur par défaut : 100.
   - @savenergy et @plotenergy sont des booléens pour sauvegarder et tracer l'énergie au fur et à mesure. Valeur par défaut : 1.
   - @countvortices (seulement en 2D) est un booléen pour compter le nombre de vortex et donner leur position. Valeur par défaut : 1.

3. On peut contrôler le maillage construit initialement en imposant les paramètres suivants :
   - @aRdom est un coefficient par lequel on multiplie le rayon de Thomas-Fermi pour obtenir un domaine de rayon un peu plus grand. Valeur par défaut : 1.25.
   - @nbseg le nombres de segments sur le bord du maillage. Valeur par défaut : 50 en 3D et 200 en 2D.
   - @meshkind (seulement en 3D) est une chaîne de caractères qui peut prendre les valeurs *cylindre* ou *ellipsoid* et permet à l'utilisateur de choisir entre un maillage cylindrique ou ellipsoidal en 3D (voir l'annexe B). Valeur par défaut : *ellipsoid*.
   - @hminsurf est la taille minimale que peut avoir l'arête d'un triangle sur la surface du maillage ellipsoïdal. Valeur par défaut : 0.6.
   - @hminvol est la taille minimale que peut avoir l'arête d'un tétraèdre à l'intérieur du maillage ellipsoïdal. Valeur par défaut : 0.3.

4. Les paramètres pour charger une ancienne solution comme champ initial ou reprendre un calcul sont :
   - @ifILrst est un booléen, qui prend la valeur 1 si l'utilisateur veut charger un fichier pour construire le champ initial. Valeur par défaut : 0. Si ifILrst = 1, les 4 paramètres suivants doivent être spécifiés :
   - @keepmesh est un booléen permettant de choisir de garder le maillage chargé comme maillage initial (valeur 1) ou d'en construire un (valeur 0).
   - @dirload est une chaîne de caractères contenant le nom du dossier à partir duquel on peut charger les fichiers pour le maillage et la solution initiale.

- @dmesh est une chaîne de caractères contenant le nom du fichier dans lequel se trouve le maillage à charger.
- @dsol est une chaîne de caractères contenant le nom du fichier dans lequel se trouve la solution à charger.

5. Les paramètres suivants contrôlent comment construire le champ initial :
   - @mod est un entier. Si @mod > 0, un vortex central de charge @mod est ajouté au centre de l'approximation axisymétrique constuite avec Ipopt. Valeur par défaut : 0.
   - @narray est le nombre de cercles de vortex manufacturés que l'on souhaite ajouter dans la solution initiale (voir section 3.1.3). Valeur par défaut : 0.
     Si narray ≥ 1, les 8 paramètres suivants doivent être fixés :
   - @Nv, le nombre de vortex sur chaque cercle,
   - @Rarr, le rayon du premier cercle de vortex,
   - @dRarr, la distance entre deux cercles de vortex successifs,
   - @Tharr, l'orientation du premier cercle de vortex,
   - @dTharr, un pas de décalage (angle polaire) entre l'orientation de chaque cercle de vortex,
   - @shape (seulement en 3D) est une chaîne de caractères contrôlant la forme du modèle de vortex ajouté dans le champ initial (voir 3.1.5). Ce paramètre peut prendre les valeurs I, Ux, Uy, Sx, Sy. Le x ou y indique si le vortex est courbé dans le plan (O, x, z) ou (O, y, z). Valeur par défaut : I.
   - @curvature ($= \alpha_v$, seulement en 3D) est un paramètre contrôlant la courbure du modèle de vortex (voir 3.1.5). Valeur par défaut : 10.
   - @length ($= \beta_v$, seulement en 3D) est un paramètre contrôlant la longueur du modèle de vortex (see 3.1.5). Valeur par défaut : 2.
6. L'utilisateur peut contrôler l'adaptation de maillage avec les paramètres suivants :
   - @ifIadapt est un booléen pour choisir d'adapter ou non le maillage initial par rapport la solution initiale. Valeur par défaut : 1.
   - @erradaptI est l'erreur dans l'adaptation du maillage du champ initial. Ce paramètre est utilisé dans la fonction adaptmesh de FreeFem++ en 2D et la fonction mshmet en 3D. Valeur par défaut : 0.01 en 3D and 0.1 en 2D.
   - @ifRadapt est un booléen pour choisir d'adapter ou non le maillage pendant la construction de la solution. Valeur par défaut : 1.
   - @hminad est la valeur minimale de la taille d'une arête dans la nouveau maillage. Valeur par défaut : 0.001.
   - @hmaxad est la valeur maximale de la taille d'une arête dans la nouveau maillage. Valeur par défaut : 1.
   - @erradapt est l'erreur dans l'adaptation du maillage. Elle change au fur et à mesure que la méthode de gradient de Sobolev avance. Si la méthode utilisant Ipopt est utilisée elle correspond au paramètre $\varepsilon_{\text{adapt}}$ dans (3.3.15). Valeur par défaut : 0.01 en 3D et 0.1 en 2D pour la méthode de gradient de Sobolev et 0.008 en 3D et 0.005 en 2D pour la méthode utilisant Ipopt.
   - @anisoadapt est un réel. Si @anisoadapt > 0, l'adaptation de maillage sera anisotrope et le rapport entre la plus grande et la plus petite arête de chaque triangle sera borné par @anisoadapt. Valeur par défaut : 10.
7. Les paramètres suivants sont utilisés pour l'adaptation de maillage quand la méthode de gradient de Sobolev est sélectionnée :
   - @EPSAD1 est la valeur du premier seuil de l'erreur relative à atteindre pour faire la première adaptation de maillage ($= \varepsilon^1$ dans 3.2.2). Valeur par défaut : 10^{-2}.
   - @EPSADMIN est le dernier seuil ($= \varepsilon_c$ dans 3.2.2). Valeur par défaut : 10^{-9}.

- @IPASSAL est le nombre de fois que l'on fait une adaptation de maillage avant de diminuer le seuil EPSAD1 (N_{ad} dans 3.2.2). Valeur par défaut : 2.
- @EPSADSTEP est un facteur par lequel on divise EPSAD1 pour changer sa valeur. Valeur par défaut : 2.
- @ITERADAPT est le nombre maximum d'itérations entre deux adaptations de maillage. Si $ITERADAPT = 0$, on n'utilise pas ce critère de contrôle. Valeur par défaut : 0.

8. Les derniers paramètres sont utiles pour l'adaptation de maillage avec la méthode Ipopt :
   - @niadapt est le nombre de fois qu'une adaptation de maillage est réalisée en gardant la même erreur ε_k (voir (3.3.15)). Valeur par défaut : 1.
   - @nbadapt est le nombre total d'adaptations de maillage qui est réalisé (n_{adapt} dans (3.3.15)). Valeur par défaut : 6 en 3D et 4 en 2D.
   - @maerr1 est l'erreur initiale dans l'adaptation de maillage (ε_0 dans (3.3.15)). Valeur par défaut : 0.01.

Fichiers de sortie

Quand une simulation est lancée, le dossier *Output* est créé. Il contient un dossier, dont le nom correspond au préfixe défini par le paramètre @dircase, la forme du potentiel (quadratique ou quartique) et la méthode de résolution choisie. Ce dossier contiendra à la fin de la simulation un fichier d'extension *.echo* présentant un résumé des paramètres d'entrée, des informations sur le déroulement de la simulation, ainsi que la valeur de l'énergie finale et le temps CPU. Ensuite, le fichier *plot.gp* contient un script Gnuplot qui peut être lancé pour tracer l'évolution de l'énergie, de l'erreur, du moment angulaire ou de la norme L^2 de la solution. Les fichiers d'extension *.mesh* et *.rst* contiennent, respectivement, le maillage et la solution à certaines itérations. Ils peuvent être utilisés pour reprendre une simulation. Finalement, les fichiers d'extension *.tec* ou *.vtk* contiennent la solution à certaines itérations (définies par le paramètre ITERPLOT) au format *tecplot* ou *vtk*.

Ajouts dans le logiciel GPFEM-time pour la simulation du problème d'évolution en temps

1. Le fichier *BEC_$\mathcal{X}$D_ ToolBox.edp* contient toujours le code principal.
2. Le dossier *Input* contient deux fichiers supplémentaires pour sélectionner des paramètres d'entrée :
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ time_ param.dat* contient les différents paramètres liés à l'évolution en temps : pas de temps, temps de début et de fin, méthode utilisée etc...
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ potentiel.idp* permet de construire le potentiel de piégeage, sous forme de fonction de FreeFem++.
3. Le dossier *Include* contient 5 fichiers supplémentaires :
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ comput_ time_ param.idp* lit le fichier de paramètres d'entrée *BEC_$\mathcal{X}$D_ time_ param.dat* et construit les constantes informatiques.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ comput_ time_ init_ condition.idp* construit le potentiel de piégeage (défini dans *BEC_$\mathcal{X}$D_ potentiel.idp*) et certaines fonctions nécessaires à la simulation.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ Time_ splitting_ Lie.idp* résout le problème principal avec la méthode de splitting de Lie-Trotter.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ Time_ splitting_ Strang.idp* résout le problème principal avec la méthode de splitting de Strang.
   - *BEC_$\mathcal{X}$D_ Relax.idp* résout le problème principal avec la méthode de relaxation.

4. Les paramètres d'entrée contenus dans le fichier *BEC_$\mathcal{X}$D_time_param.dat* sont les suivants :
   - @scheme est une chaîne de caractères prenant les valeurs Lie, Strang ou Relax, et permettant de choisir le schéma en temps.
   - @nbtimes définit le nombre de subdivisions de l'intervalle de temps sur lequel le calcul est effectué.
   - @Tmax est la valeur maximale de l'intervalle de temps sur lequel le calcul est effectué.
   - @iftadapt est un booléen pour choisir si l'on effectue ou non l'adaptation de maillage lors de la simulation.
   - @terradapt définit l'erreur dans l'adaptation de maillage.
   - @iteradapt définit la fréquence d'itération à laquelle adapter le maillage.
   - @itersavet définit la fréquence d'itération à laquelle sauvegarder la solution.
   - @computgs est un booléen qui prend la valeur 1 si on souhaite construire, comme solution à $t = 0$, l'état fondamental en utilisant la méthode de gradient de Sobolev ou Ipopt (ceci dépendra alors des paramètres du fichier *BEC_$\mathcal{X}$D_run_param.dat*). Sinon, pour la valeur 0, on considère, comme solution à $t = 0$, l'état initial défini dans le cas stationnaire (qui dépendra aussi des paramètres du fichier *BEC_$\mathcal{X}$D_run_param.dat*) et qui est, soit l'approximation de Thomas-Fermi, soit l'approximation utilisant Ipopt axisymétrique, soit l'approximation utilisant Ipopt sans rotation, soit une solution correspondant à un fichier de maillage et une ancienne solution chargés.
5. Le fichier *BEC_$\mathcal{X}$D_potential.idp* contient les éléments suivants :
   - Un booléen auquel la valeur 1 est donnée si le potentiel de piégeage dépend du temps, 0 sinon :

     ```
     bool tdependant = [à compléter];
     ```

   - Un booléen auquel la valeur 1 est donnée si l'utilisateur connaît une primitive du potentiel de piégeage, 0 sinon :

     ```
     bool primitive = [à compléter];
     ```

   - La fonction définissant le potentiel de piégeage :

     ```
     func real pot(real xx, real yy, real t){
          return [à compléter];
     }
     ```

   - La fonction définissant la primitive du potentiel de piégeage :

     ```
     func real prim(real xx, real yy, real t){
          return [à compléter];
     }
     ```

Bibliographie

J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels and W. Ketterle. Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates. *Science*, 292 :476, 2001.

S.K. Adhikari. Numerical study of the spherically symmetric Gross-Pitaevskii equation in two space dimensions. *Phys. Rev. E*, 62 :2937–2944, 2000.

A. Aftalion. *Vortices in Bose-Einstein Condensates*. Birkhauser, 2006.

A. Aftalion and I. Danaila. Three-dimensional vortex configurations in a rotating Bose-Einstein condensate. *Physical Review A*, 68 :023603(1–6), 2003.

A. Aftalion and I. Danaila. Giant vortices in combined harmonic and quartic traps. *Physical Review A*, 69 :033608(1–6), 2004.

A. Aftalion and Q. Du. Vortices in a rotating Bose-Einstein condensate : critical angular velocities and energy diagrams in the Thomas-Fermi regime. *Phys. Rev. A*, 64 :063603, 2001.

A. Aftalion and T. Rivière. Vortex energy and vortex bending for a rotating Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 64 :043611, 2001.

G.D. Akrivis and V.A. Dougalis. On a class of conservative, highly accurate Galerkin methods for the Schrödinger equation. *RAIRO Model. Math. Anal. Numer.*, 25(6) :643–670, 1991.

G.D Akrivis, V.A Dougalis and O.A Karakashian. On fully discrete Galerkin methods of second-order temporal accuracy for the nonlinear Schrödinger equation. *Numerische Mathematik*, 59 :31–53, 1991.

J. F. Allen and A. D. Misener. Flow of Liquid Helium II. *Nature*, 141 :75, 1938.

M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science*, 269(5221) :198–201, 1995.

X. Antoine, C. Besse and W. Bao. Computational methods for the dynamics of the nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii equations. *Computer Physics Communications*, 184(12) :2621–2633, 2013.

X. Antoine and R. Duboscq. GPELab, a Matlab toolbox to solve Gross-Pitaevskii equations I : Computation of stationary solutions. *Computer Physics Communications*, 185(11) :2969–2991, 2014.

X. Antoine and R. Duboscq. GPELab, a Matlab toolbox to solve Gross-Pitaevskii equations II : dynamics and stochastic simulations. *Computer Physics Communications*, 193 :95–117, 2015.

S. Auliac. Développement d'outils d'optimisation pour FreeFem++. *Thèse, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France*, 2014.

A. V. Avdeenkov and K. G. Zloshchastiev. Quantum Bose liquids with logarithmic nonlinearity : Self-sustainability and emergence of spatial extent. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44(19) :195303, 2011.

R. Baer. Accurate and efficient evolution of nonlinear Schrödinger equations. *Phys. Rev. A*, 62 :063810, 2000.

V. S. Bagnato, D. J. Frantzeskakis, P. G. Kevrekidis, B. A. Malomed and D. Mihalache. Bose-Einstein condensation : twenty years after. *Romanian Reports in Physics*, 67 :5–50, 2015.

L. O. Baksmaty, Y. Liub, U. Landmanc, N. P. Bigelowd and H. Pu. Numerical exploration of vortex matter in Bose-Einstein condensates. *Mathematics and Computers in Simulation*, 80 :131–138, 2009.

W. Bao. Dynamics in Models of Coarsening, Coagulation, Condensation and Quantization, in : IMS Lecture Notes Series. *World Scientific*, 9, 2007.

W. Bao and Y. Cai. Uniform Error Estimates of Finite Difference Methods for the Nonlinear Schrödinger Equation with Wave Operator. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 50(2) : 492–521, 2012.

W. Bao and Y. Cai. Mathematical theory and numerical methods for Bose-Einstein condensation. *Kinetic and related models*, 6 :1–135, 2013a.

W. Bao and Y. Cai. Optimal error estimates of finite difference methods for the Gross-Pitaevskii equation with angular momentum rotation. *Mathematics of Computation*, 82(281) :99 – 128, 2013b.

W. Bao, I-L. Chern and F. Yin Lim. Efficient and spectrally accurate numerical methods for computing ground and first excited states in Bose-Einstein condensates. *J. Comp. Physics*, 219 :836–854, 2006a.

W. Bao and Q. Du. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow. *Siam J. Sci. Comput.*, 25 :1674, 2004.

W. Bao, Q. Du and Y. Zhang. Dynamics of rotating Bose-Einstein condensates and its efficient and accurate numerical computation. *Siam J. Appl. Math.*, 66 :758, 2006b.

W. Bao, D. Jaksch and P. A. Markowich. Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensation. *J. Comput. Phys.*, 187 :318–342, 2003a.

W. Bao, S. Jin and P.A. Markowich. On Time-Splitting Spectral Approximations for the Schrödinger Equation in the Semiclassical Regime. *Journal of Computational Physics*, 175 (2) :487 – 524, 2002.

W. Bao, S. Jin and P.A. Markowich. Numerical Study of Time-Splitting Spectral Discretizations of Nonlinear Schrödinger Equations in the Semiclassical Regimes. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(1) :27–64, 2003b.

W. Bao, H. Li and J. Shen. A Generalized-Laguerre-Fourier-Hermite Pseudospectral Method for Computing the Dynamics of Rotating Bose-Einstein Condensates. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 31(5) :3685–3711, 2009.

W. Bao, H. Li and J. Shen. A simple and efficient numerical method for computing the dynamics of rotating Bose-Einstein condensates via rotating Lagrangian coordinates. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(6) :2671–2695, 2013a.

W. Bao and J. Shen. A fourth-order time-splitting Laguerre-Hermite pseudospectral method for Bose-Einstein condensates. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26 :2010–2028, 2005.

W. Bao and J. Shen. A generalized Laguerre-Hermite pseudospectral method for computing symmetric and central vortex states in Bose-Einstein condensates. *J. Comp. Physics*, 227 : 9778–9793, 2008.

W. Bao and Q. Tang. Numerical Study of Quantized Vortex Interactions in the Nonlinear Schrödinger Equation on Bounded Domains. *Multiscale Modeling & Simulation*, 12(2) : 411–439, 2014.

W. Bao, Q. Tang and Z. Xu. Numerical methods and comparison for computing dark and bright solitons in the nonlinear Schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, 235 :423 – 445, 2013b.

W. Bao and W. Tang. Ground-state solution of Bose-Einstein condensate by directly minimizing the energy functional. *J. Comp. Physics*, 187 :230–254, 2003.

W. Bao and H. Wang. An efficient and spectrally accurate numerical method for computing dynamics of rotating Bose-Einstein condensates. *J. Comput. Phys.*, 217 :612–626, 2006.

W. Bao and Y. Zhang. Dynamics of the ground state and central vortex states in Bose-Einstein condensation. *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.*, 15 :1863–1896, 2005.

C. F. Barenghi, R. J. Donnelly and W. F. Vinen, editors. *Quantized Vortex Dynamics and Superfluid Turbulence*. Number 571 in Lecture Notes in Physics. Springer, 2001.

C. F. Barenghi and Y. A. Sergeev, editors. *Vortices and Turbulence at Very Low Temperatures*. Number 501 in CISM International Centre for Mechanical Sciences. Springer, 2008.

N. G. Berloff. Interactions of vortices with rarefaction solitary waves in a Bose-Einstein condensate and their role in the decay of superfluid turbulence. *Phys. Rev. A*, 69 :053601, 2004.

C. Besse, B. Bidegaray and S. Descombes. Order estimates in time of splitting methods for the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 40(1) :26–40, 2002.

Christophe Besse. A Relaxation Scheme for the Nonlinear Schrödinger Equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 42(3) :934–952, 2004.

R. N. Bisset, Wenlong Wang, C. Ticknor, R. Carretero-González, D. J. Frantzeskakis, L. A. Collins and P. G. Kevrekidis. Robust vortex lines, vortex rings, and hopfions in three-dimensional Bose-Einstein condensates. *Physical Review A*, 92 :063611, 2015.

H. Borouchaki, M. J. Castro-Diaz, P. L. George, F. Hecht and B. Mohammadi. Anisotropic adaptive mesh generation in two dimensions for CFD. In *5th Inter. Conf. on Numerical Grid Generation in Computational Field Simulations*. Mississipi State Univ., 1996.

S. Bose. Plancks gesetz und lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik*, 26(1) :178–181, 1924.

V. Bretin, P. Rosenbusch, F. Chevy, G.V. Shlyapnikov and J. Dalibard. Quadrupole Oscillation of a Single-Vortex Bose-Einstein Condensate : Evidence for Kelvin Modes. *Phys. Rev. Lett.*, 90 :100403, 2003.

V. Bretin, S. Stock, Y. Seurin and J. Dalibard. Fast Rotation of a Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :050403, 2004.

C. Dobrzynski C. Dapogny and P. Frey. Three-dimensional adaptive domain remeshing, implicit domain meshing, and applications to free and moving boundary problems. *Journal of Computational Physics 262, pp. 358-378*, 2014.

M. Caliari, C. Neuhauser and M. Thalhammer. High-order time-splitting Hermite and Fourier spectral methods for the Gross-Pitaevskii equation. *Journal of Computational Physics*, 228(3) :822–832, 2009.

M. Caliari and S. Rainer. GSGPEs : A MATLAB code for computing the ground state of systems of Gross-Pitaevskii equations. *Computer Physics Communications*, 184(3) :812 – 823, 2013.

R.M. Caplan. NLSEmagic : Nonlinear Schrödinger equation multi-dimensional Matlab-based GPU-accelerated integrators using compact high-order schemes. *Computer Physics Communications*, 184(4) :1250–1271, 2013.

B.M. Caradoc-Davies, R.J. Ballagh and K. Burnett. Coherent Dynamics of Vortex Formation in Trapped Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :895–898, 1999.

B.M. Caradoc-Davies, R.J. Ballagh and K. Burnett. Three-dimensional vortex dynamics in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 62 :011602, 2000.

Y. Castin and R. Dum. Bose-Einstein Condensates with vortices in rotating traps. *Eur. Phys. J. D*, 7 :399–412, 1999.

M. Castro-Diaz, F. Hecht and B. Mohammadi. Anisotropic Grid Adaptation for Inviscid and Viscous Flows Simulations. *Int. J. Comput. Fluid Dynamics*, 25 :475–491, 2000.

T. Cazenave. Semilinear Schrödinger Equations, in : Courant Lecture Notes Mathematic. *Americain Mathematic Society*, 10, 2003.

Q. Chang, B.L. Guo and H. Jiang. Finite difference method for generalized Zakharov equations. *Math. Comp.*, 64(7) :537–553, 1995.

Q. Chang, E. Jia and W. Sun. Difference Schemes for Solving the Generalized Nonlinear Schrödinger Equation. *Journal of Computational Physics*, 148(2) :397 – 415, 1999.

S.A. Chin and C.R. Chen. Fourth order gradient symplectic integrator methods for solving the time-dependent Schrödinger equation. *The Journal of Chemical Physics*, 114(17) :7338–7341, 2001a.

S.A. Chin and C.R. Chen. Gradient symplectic algorithms for solving the Schrödinger equation with time-dependent potentials. *The Journal of Chemical Physics*, 117(4) :1409–1415, 2001b.

F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Rev. Mod. Phys.*, 71 :463–512, 1999.

I. Danaila. Three-dimensional vortex structure of a fast rotating Bose-Einstein condensate with harmonic-plus-quartic confinement. *Phys. Review A*, 72 :013605(1–6), 2005.

I. Danaila and F. Hecht. A finite element method with mesh adaptivity for computing vortex states in fast-rotating Bose-Einstein condensates. *Journal of Computational Physics*, 229 : 6946–6960, 2010.

I. Danaila and P. Kazemi. A new Sobolev gradient method for direct minimization of the Gross–Pitaevskii energy with rotation. *SIAM J. Sci. Computing*, 32 :2447–2467, 2010.

I. Danaila and B. Protas. Computation of Ground States of the Gross-Pitaevskii Functional via Riemannian Optimization. *arXiv*, arXiv :1703.07693, 2017.

K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn and W. Ketterle. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75 : 3969–3973, 1995.

L. de Broglie. Recherches sur la théorie des quanta. *Ann. Phys.*, 3, 1925.

P. de Gennes. *Superconductivity of Metals and Alloys.* Perseus Books, 1999.

C. M. Dion and E. Cancès. Ground state of the time-independent Gross-Pitaevskii equation. *Computer Physics Communications*, 177 :787–798, 2007.

C. Dobrzynski and P.J. Frey. *MMG3D : User Guide. [Technical Report] RT-0422.* INRIA hal-00681813, 2012.

A. Durán and J.M. Sanz-Serna. The numerical integration of relative equilibrium solutions. The nonlinear Schrödinger equation. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 20(2) :235–261, 2000.

A. Einstein. Quantentheorie des idealen Gases. *Preussiche Akademie der Wissenschaften (Berlin), Physikalisch-Mathematische Klasse*, 23 :3–14, 1925.

C. Farhat and J. Toivanen. A hybrid discontinuous Galerkin method for computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates. *Journal of Computational Physics*, 231 :4709–4722, 2012.

A. L. Fetter, B. Jackson and S. Stringari. Rapid rotation of a Bose-Einstein condensate in a harmonic plus quartic trap. *Phys. Rev. A*, 71 :013605, 2005.

R. P. Feynman. *Progress in Low Temperature Physics*, volume I. C. J. Gorter, North-Holland, Amsterdam, 1955.

D. J. Frantzeskakis. Dark solitons in atomic Bose-Einstein condensates : from theory to experiments. *J. Phys. A : Math. Theor.*, 43 :213001 (1–68), 2010.

P. J. Frey. *Medit : An interactive mesh visualisation software, RT-0253.* INRIA, 2001a.

P. J. Frey. *YAMS : A fully automatic adaptive isotropic surface remeshing procedure, RT-0252.* INRIA, 2001b.

D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner and T. J. Greytak. Bose-Einstein condensation of atomic hydrogen. *Physical Review Letters*, 81 : 3811–3814, 1998.

M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth, F. Rossi and R. Ulerich. *GNU Scientific Library Reference Manual (3rd Ed.), ISBN 0954612078.* www.gnu.org, 2015.

J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García. Optimizing Schrödinger Functionals Using Sobolev gradients : application to quantum mechanics and nonlinear optics. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23 :1315–1333, 2001a.

J. J. García-Ripoll and V. M. Pérez-García. Vortex bending and tightly packed vortex lattices in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 64 :053611, 2001b.

J. J. García-Ripoll, V. M. Pérez-García and V. Vekslerchik. Construction of exact solutions by spatial translations in inhomogeneous nonlinear Schrödinger equations. *Phys. Rev. E*, 64 : 056602, 2001.

L. Gauckler and C. Lubich. Splitting Integrators for Nonlinear Schrödinger Equations Over Long Times. *Foundations of Computational Mathematics*, 10(3) :275–302, 2010.

P. L. George and H. Borouchaki. *Delaunay triangulation and meshing.* Hermès, Paris, 1998.

R. T. Glassey. Convergence of an energy-preserving scheme for the Zakharov equations in one space dimension. *Math. Comp.*, 58 :83–102, 1992.

E. P. Gross. Structure of a quantized vortex in boson systems. *Il Nuovo Cimento Series 10*, 20(3) :454–477, 1961.

B.Y. Guo. The convergence of numerical method for nonlinear schrödinger equations. *J. Comput. Math.*, 4(2) :121–130, 1986.

H. E. Hall and W. F. Vinen. *Proc. Roy. Soc. A*, 238, 1956.

B. Halperin and M. Tsubota. *Quantum Turbulence.* Number 16 in Progress in Low Temperature Physics. Springer, 2009.

Si. Hang. *TetGen, a Delaunay-Based Quality Tetrahedral Mesh Generator*, volume 41(2)-11. 2015.

R.H. Hardin and F.D. Tappert. Application of the split-step Fourier method to the numerical solution of nonlinear and variable coefficient wave equations. *SIAM Review*, 15(1) :423–428, 1973.

C. E. Hecht. The possible superfluid behaviour of hydrogen atom gases and liquids. *Physica*, 25 :1159–1161, 1959.

F. Hecht. New developments in Freefem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20 :251–266, 2012.

F. Hecht and B. Mohammadi. Mesh Adaptation by Metric Control for Multi-scale Phenomena and Turbulence. *AIAA paper*, 97 :0859, 1997.

F. Hecht, O. Pironneau, A. Le Hyaric and K. Ohtsuke. *FreeFem++ (manual).* www.freefem.org, 2007.

Vicente Hernandez, Jose E. Roman and Vicente Vidal. SLEPc : A Scalable and Flexible Toolkit for the Solution of Eigenvalue Problems. *ACM Trans. Math. Softw.*, 31(3) :351–362, 2005.

H. F. Hess, G. P. Kochanski, J. M. Doyle, N. Masuhara, D. Kleppner and T. J. Greytak. Magnetic trapping of spin-polarized atomic hydrogen. *Physical Review Letters*, 59, 1987.

U. Hohenester. OCTBEC A Matlab toolbox for optimal quantum control of Bose-Einstein condensates. *Computer Physics Communications*, 185(1) :194–216, 2014.

Z. Huang, S. Jin, P.A. Markowich and C. Sparber. A Bloch Decomposition-Based Split-Step Pseudospectral Method for Quantum Dynamics with Periodic Potentials. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 29(2) :515–538, 2007.

Z. Huang, S. Jin, P.A. Markowich and C. Sparber. Numerical Simulation of the Nonlinear Schrödinger Equation with Multidimensional Periodic Potentials. *Multiscale Modeling & Simulation*, 7(2) :539–564, 2008.

A. Wächter J. Nocedal and R. A. Waltz. Adaptive barrier strategies for nonlinear interior methods. *SIAM Journal on Optimization*, 19(4) :1674–1693, 2008.

A. D. Jackson, G. M. Kavoulakis and C. J. Pethick. Solitary waves in clouds of Bose-Einstein condensed atoms. 58 :2417–2422, 1998.

T. Kapitula, P. Kevrekidis and D. J. Frantzeskakis. Disk-shaped Bose-Einstein condensates in the presence of an harmonic trap and an optical lattice. *Chaos*, 18, 2016.

P. L. Kapitza. Viscosity of Liquid Helium below the λ-Point. *Nature*, 141 :74, 1938.

K. Kasamatsu, M. Machida, N. Sasa and M. Tsubota. Three-dimensional dynamics of vortex-lattice formation in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, 71 :063616, 2005.

K. Kasamatsu and M. Tsubota. Quantized vortices in atomic Bose-Einstein condensates. *Prog. Low Temp. Phys.*, 16 :351–403, 2008.

P. Kazemi and M. Eckart. Minimizing the Gross-Pitaevskii energy functional with the Sobolov gradient– Analytical and numerical results. *preprint available*, arXiv :0906.3206, 2009.

P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis and R. Carretero-González, editors. *Emergent Nonlinear Phenomena in Bose-Einstein Condensates.* Number 45 in Atomic, Optical, and Plasma Physics. Springer, 2008.

P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis and R. Carretero-González. *The Defocusing Nonlinear Schrödinger Equation : From Dark Solitons to Vortices and Vortex Rings.* SIAM, 2015.

M. Kilgard. *GLUT 3.7.* https ://www.opengl.org/resources/libraries/glut/, 2000.

E. B. Kolomeisky, T. J. Newman, J. P. Straley and X. Qi. Low-dimensional Bose liquids : beyond the Gross-Pitaevskii approximation. *Physical Review Letters*, 85(6) :1146, 2000.

H.L. Liao, Z. Sun and H.S. Shi. Error Estimate of Fourth-Order Compact Scheme for Linear Schrödinger Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 47(6) :4381–4401, 2010.

E. H. Lieb and M. Loss. *Analysis, Graduate Studies in Mathematics, 2nd edition.* Amer. Math. Soc., 2001.

E. H. Lieb, R. Seiringer, J. P. Solovej and J. Yngvason. *The Mathematics of the Bose Gas and its Condensation.* Birkhauser Basel, 2005.

E. H. Lieb, R. Seiringer and J. Yngvason. Bosons in a trap : A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional. *Phys. Rev. A*, 61 :043602, 2000.

F. London. The λ-phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy. *Nature*, 141 :643–644, 1938.

C. Lubich. On splitting methods for Schrödinger-Poisson and cubic nonlinear Schrödinger equations. *Mathematics of Computation*, 77(264) :2141–2153, 2008.

K. W. Madison, F. Chevy, V. Bretin and J. Dalibard. Stationary States of a Rotating Bose-Einstein Condensate : Routes to Vortex Nucleation. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4443, 2001.

K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben and J. Dalibard. Vortex Formation in a Stirred Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :806, 2000a.

K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben and J. Dalibard. Vortices in a stirred Bose-Einstein condensate. *J. Mod. Opt.*, 47 :2715, 2000b.

S. Middelkamp, P. G. Kevrekidis, D. J. Frantzeskakis, R. Carretero-González and P. Schmelcher. Bifurcations, stability, and dynamics of multiple matter-wave vortex states. *Physical Review A*, 82 :013646, 2010a.

S Middelkamp, P G Kevrekidis, D J Frantzeskakis, R Carretero-González and P Schmelcher. Stability and dynamics of matter-wave vortices in the presence of collisional inhomogeneities and dissipative perturbations. *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics*, 43(15) :155303, 2010b.

M. Modugno, L. Pricoupenko and Y. Castin. Bose-Einstein condensates with a bent vortex in rotating traps. *European Physical Journal D*, 22 :0203597, 2003.

P. Muruganandam and S.K. Adhikari. Fortran programs for the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap. *Computer Physics Communications*, 180 (10) :1888–1912, 2009.

C. Neuhauser and M. Thalhammer. High-order time-splitting Hermite and Fourier spectral methods for the Gross-Pitaevskii equation. *BIT Numerical Mathematics*, 49(1) :199–215, 2009.

L. Onsager. Statistical hydrodynamics. *Nuovo Cimento*, 6, 1949.

R. E. Packard and T. M. Sanders. Observations on single vortex lines in rotating superfluid helium. *Phys. Rev. A*, 6, 1972.

P.Antonelli, D. Marahrens and C. Sparber. On the Cauchy problem for nonlinear Schrödinger equations with angular momentum rotation term. *Discrete. Contin. Dyn. Syst. Ser. A*, 32 : 703–715, 2012.

D. Pathria and J. L. l. Morris. Pseudo-spectral solution of nonlinear Schrödinger equations. *Journal of Computational Physics*, 87(1) :108–125, 1990.

D. Pelinovsky and P. Kevrekidis. Periodic oscillations of dark solitons in parabolic potentials. *AMS Contemporary Mathematics*, 473, 2008.

C. J. Pethick and H. Smith. Bose-Einstein condensation in dilute gases. *Cambridge University Press*, 2002.

L. P. Pitaevskii. Vortex lines in an imperfect Bose gas. *Soviet Physics JETP-USSR*, 13(2), 1961.

L. P. Pitaevskii and S. Stringari. *Bose-Einstein condensation.* Clarendon Press, Oxford, 2003.

C. Yang R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen. *ARPACK Users' Guide : Solution of Large Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi Method.* http ://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/, 1997.

C. Raman, J. R. Abo-Shaeer, J. M. Vogels, K. Xu and W. Ketterle. Vortex Nucleation in a Stirred Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :210402, 2001.

C. Raman, M. Köhl, R. Onofrio, D. S. Durfee, C. E. Kuklewicz, Z. Hadzibabic and W. Ketterle. Evidence for a Critical Velocity in a Bose-Einstein Condensed Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 83 : 2502, 1999.

M.P. Robinson, G. Fairweather and B.M. Herbst. On the Numerical Solution of the Cubic Schrödinger Equation in One Space Variable. *Journal of Computational Physics*, 104(1) : 277 – 284, 1993.

P. Rosenbusch, V. Bretin and J. Dalibard. Dynamics of a Single Vortex Line in a Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :200403, 2002.

H. Saito and M. Ueda. Intermittent Implosion and Pattern Formation of Trapped Bose-Einstein Condensates with an Attractive Interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :1406–1409, 2001.

L. Salasnich, A. Parola and L. Reatto. Effective wave equations for the dynamics of cigar-shaped and disk-shaped Bose condensates. *Physical Review A*, 65(4) :043614, 2002.

J. M. Sanz-Serna. Methods for the numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation. *Math. Comp.*, 43 :21–27, 1984.

J. M. Sanz-Serna. Conservative and nonconservative schemes for the solution of the nonlinear Schrödinger equation. *Math. Comp.*, 6(1) :25–42, 1986.

J. Shen and Z.Q. Wang. Error Analysis of the Strang Time-Splitting Laguerre–Hermite/Hermite Collocation Methods for the Gross–Pitaevskii Equation. *Foundations of Computational Mathematics*, 13(1) :99–137, 2013.

G. Strang. On the construction and comparaison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 5 :506–517, 1968.

S. Stringari. Phase diagram of quantized vortices in a trapped Bose-Einstein condensed gas. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :4371, 1999.

W. C. Stwalley and L. H. Nosanov. Possible new quantum system. *Phys. Rev. Lett*, 36, 1976.

C. Sulem and P. Sulem. The Nonlinear Schrödinger Equation : Self Focusing and Wave Collapse. *Springer*, 1999.

T. R. Taha and M. I. Ablowitz. Analytical and numerical aspects of certain non- linear evolution equations. ii. Numerical, nonlinear Schrödinger equation. *Journal of Computational Physics*, 55(2) :203–230, 1984.

M. Thalhammer. High-order exponential operator splitting methods for time- dependent Schrödinger equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 46(4) :2022–2038, 2008.

M. Thalhammer. Convergence Analysis of High-Order Time-Splitting Pseudospectral Methods for Nonlinear Schrödinger Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 50(6) :3231–3258, 2012.

R. P. Tiwari and A. Shukla. A basis-set based Fortran program to solve the Gross-Pitaevskii equation for dilute Bose gases in harmonic and anharmonic traps. *Computer Physics Communications*, 174(12) :966–982, 2006.

M. Tsubota, K. Kasamatsu and M. Ueda. Vortex lattice formation in a rotating Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A*, 65 :023603, 2002.

M-G. Vallet. Génération de maillages éléments finis anisotropes et adaptatifs. *Thèse, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France*, 1992.

G. Vergez, I. Danaila, S. Auliac and F. Hecht. A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation. *Computer Physics Communications*, 50(6) :144–162, 2016.

D. Vudragović, I. Vidanović, A. Balaz, P. Muruganandam and S. K. Adhikari. C programs for solving the time-dependent Gross-Pitaevskii equation in a fully anisotropic trap. *Computer Physics Communications*, 183(9) :2021 – 2025, 2012.

A. Wächter. An Interior Point Algorithm for Large-Scale Nonlinear Optimization with Applications in Process Engineering. *PhD thesis, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA*, 2002.

A. Wächter and L. T. Biegler. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming 106(1), pp. 25-57*, 2006.

Hanquan Wang. Numerical studies on the split-step finite difference method for nonlinear Schrödinger equations. *Applied Mathematics and Computation*, 170(1) :17 – 35, 2005.

T. Wang. Maximum norm error bound of a linearized difference scheme for a coupled nonlinear Schrödinger equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 235(14) :4237–4250, 2011.

J. A. C. Weideman and B. M. Herbst. Split-step methods for the solution of the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 23(3) :485–507, 1986.

T. Williams and C. Kelley. *Gnuplot 5.0 : An interactive plotting programm.* http ://www.gnuplot.info/, 2015.

X. Wu, Z. Wen and W. Bao. A Regularized Newton Method for Computing Ground States of Bose–Einstein Condensates. *Journal of Scientific Computing*, pages 1 – 27, 2017.

S.S. Xie, G.X. Li and S. Yi. Compact finite difference schemes with high accuracy for one-dimensional nonlinear Schrödinger equation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(9-12) :1052 – 1060, 2009.

R. Zeng and Y. Zhang. Efficiently computing vortex lattices in rapid rotating Bose-Einstein condensates. *Computer Physics Communications*, 180 :854–860, 2009.

Y. Zhang and W. Bao. Dynamics of the center of mass in rotating Bose-Einstein condensates. *Applied Numerical Mathematics*, 57(5) :697 – 709, 2007.

Résumé

Le phénomène de condensation d'un gaz de bosons lorsqu'il est refroidi à zéro degrés Kelvin fut décrit par Einstein en 1925 en s'appuyant sur des travaux de Bose. Depuis lors, de nombreux physiciens, mathématiciens et numériciens se sont intéressés au condensat de Bose-Einstein et à son caractère superfluide. Nous proposons dans cette étude des méthodes numériques ainsi qu'un code informatique pour la simulation d'un condensat de Bose-Einstein en rotation. Le principal modèle mathématique décrivant ce phénomène physique est une équation de schrödinger présentant une non-linéarité cubique, découverte en 1961 : l'équation de Gross-Pitaevskii (GP). En nous appuyant sur le logiciel FreeFem++, nous nous servons d'une discrétisation spatiale en éléments-finis pour résoudre numériquement cette équation. Une méthode d'adaptation du maillage à la solution et l'utilisation d'éléments-finis d'ordre deux nous permet de résoudre finement le problème et d'explorer des configurations complexes en deux ou trois dimensions d'espace. Pour sa version stationnaire, nous avons développé une méthode de gradient de Sobolev ou une méthode de point intérieur implémentée dans la librairie Ipopt. Pour sa version instationnaire, nous utilisons une méthode de Time-Splitting combinée à un schéma de Crank-Nicolson ou une méthode de relaxation. Afin d'étudier la stabilité dynamique et thermodynamique d'un état stationnaire, le modèle de Bogoliubov-de Gennes propose une linéarisation de l'équation de Gross-Pitaevskii autour de cet état. Nous avons élaboré une méthode permettant de résoudre ce système aux valeurs et vecteurs propres, basée sur un algorithme de Newton ainsi que sur la méthode d'Arnoldi implémentée dans la librairie Arpack.

Mots-clefs : FreeFem++, Ipopt, Gross-Pitaevskii, Bose-Einstein, éléments finis, adaptation de maillage, méthode de splitting, relaxation, Crank-Nicolson, Newton, Bogoliubov-de Gennes, Arpack.

Adaptive Finite-Element Methods for the Numerical Simulation of Bose-Einstein Condensates

Abstract

The phenomenon of condensation of a boson gas when cooled to zero degrees Kelvin was described by Einstein in 1925 based on work by Bose. Since then, many physicists, mathematicians and digitizers have been interested in the Bose-Einstein condensate and its superfluidity. We propose in this study numerical methods as well as a computer code for the simulation of a rotating Bose-Einstein condensate. The main mathematical model describing this phenomenon is a schrödinger equation with a cubic non-linearity, discovered in 1961: the Gross-Pitaevskii (GP) equation. By using the software FreeFem++ and a finite elements spatial discretization we solve this equation numerically. The mesh adaptation to the solution and the use of finite elements of order two allow us to solve the problem finely and to explore complex configurations in two or three dimensions of space. For its stationary version, we have developed a Sobolev gradient method or an internal point method implemented in the Ipopt library. For its unsteady version, we use a Time-Splitting method combined with a Crank-Nicolson scheme or a relaxation method. In order to study the dynamic and thermodynamic stability of a stationary state, the Bogoliubov-de Gennes model proposes a linearization of the Gross-Pitaevskii equation around this state. We have developed a method to solve this eigenvalues and eigenvector system, based on a Newton algorithm as well as the Arnoldi method implemented in the Arpack library.

Keywords : FreeFem++, Ipopt, Gross-Pitaevskii, Bose-Einstein, finite elements, mesh adaptivity, splitting method, relaxation, Crank-Nicolson, Newton, Bogoliubov-de Gennes, Arpack.