

Simulation de condensats de Bose-Einstein avec FreeFem++

Guillaume VERGEZ, LMRS, Université de Rouen

L'état d'équilibre d'un condensat de Bose-Einstein en rotation est décrit par le problème suivant : soit \mathcal{D} un domaine ouvert, borné de \mathbb{R}^3 ; on souhaite trouver numériquement une solution $u \in H_0^1(\mathcal{D})$ de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire

$$-\frac{1}{2}\Delta u + V_{trap}u + C_g|u|^2u - iC_\Omega(y\partial_x u - x\partial_y u) = 0,$$

où C_g et C_Ω sont des constantes physiques qui dépendent du nombre de particules, de la longueur de diffusion et de la vitesse de rotation et

$$V_{trap} = \frac{1}{2}(a_x x^2 + a_y y^2 + a_z z^2 + a_4(x^2 + y^2)^2) \text{ est le potentiel de piégeage.}$$

On impose, de plus, la contrainte de norme unitaire (conservation de la masse) :

$$\int_D |u|^2 = 1.$$

Une méthode de gradient de Sobolev projeté, adaptée à la minimisation de l'énergie de Gross-Pitaevskii, a été proposée dans [1]. La méthode a été optimisée pour le calcul avec éléments finis, en y ajoutant une adaptation de maillage dans [2].

Récemment, une nouvelle méthode à maillage adaptatif, basée sur l'utilisation de la bibliothèque Ipopt développée dans [3], a été implémentée par F. Hecht dans FreeFem++.

Après avoir présenté ces différentes méthodes, nous commencerons par exposer une nouvelle contribution à la méthode de gradient de Sobolev : l'adaptation du pas de descente.

Nous montrerons ensuite une comparaison des deux méthodes (pas de descente fixe ou variable) sur des cas tests en deux dimensions.

Puis, nous présenterons une utilisation de Ipopt dans un cas axisymétrique qui nous permet de construire rapidement des conditions initiales pour nos simulations.

Enfin nous montrerons des résultats obtenues avec FreeFem++ en 2D et en 3D grâce à ces deux méthodes et nous exposerons brièvement les projets en cours pour améliorer les méthodes présentées.

Références

- [1] 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, pp. 2447-2467, 2010.
- [2] I. DANAILA AND F. HECHT, *A finite element method with mesh adaptivity for computing vortex states in fast-rotating Bose-Einstein condensates*, SIAM J. Sci. Computing 229, pp. 6946-6960, 2010.
- [3] A. WÄCHTER AND L. T. BIEGLER, *On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Filter Line Search Algorithm for Large-Scale Nonlinear Programming*, Mathematical Programming 106(1), pp. 25-57, 2006.