

Expérience numérique : Simulation d'un condensat de Bose-Einstein

*Jean-Marc Sac-Epée, institut Elie Cartan de Lorraine, université de Lorraine
Philippe Parnaudeau, LJLL, Université Pierre & Marie Curie, CNRS.*

Qu'est-ce qu'un condensat ?

- *Physique classique, théorie de la cinétique des gaz :*

Un gaz est un ensemble de Matière dont la densité est si faible que les interactions entre deux atomes sont négligées

- *Physique Quantique :*

Le Principe d'indétermination de Heisenberg ($\Delta x \Delta p \geq h/2$), donc

Une particule est un paquet d'ondes.

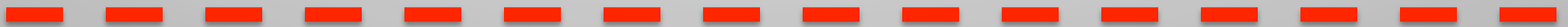
Cette délocalisation est quantifiée par la longueur d'onde λ thermique de Broglie :

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi mkT}}$$

Qu'est-ce qu'un condensat ?

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi mkT}}$$

$T \gg T_c$ Les atomes se déplacent sous forme désordonnée



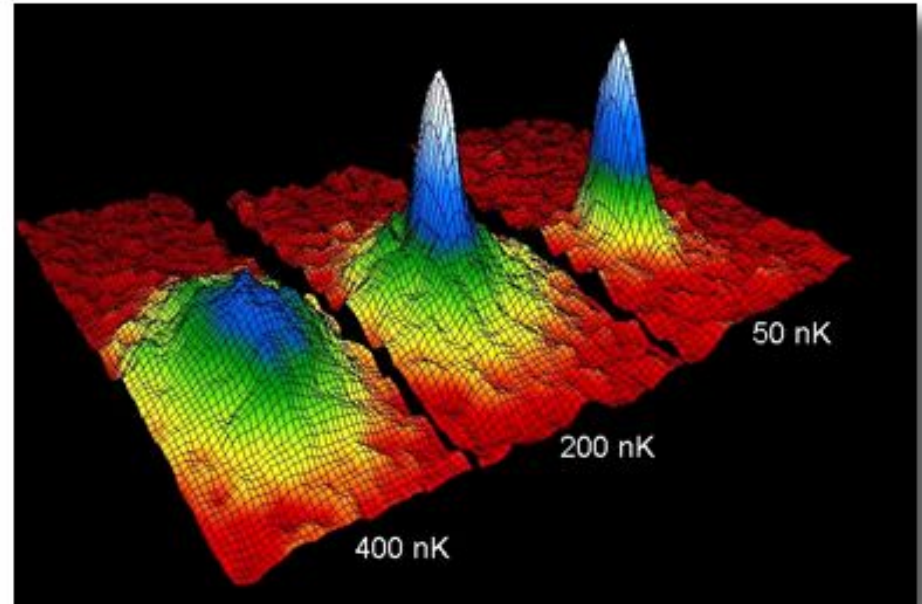
$T \geq T_c$ Les atomes se déplacent sous forme de petits paquets d'ondes

$T < T_c$ Les paquets d'ondes sont regroupés en un gros « paquet » : condensat de Bose-Einstein

En général, les condensats atomiques sont obtenus expérimentalement à partir de gaz issus de la famille des alcalins (première colonne de la classification périodique), comme le rubidium ou le césium.

Qu'est-ce qu'un condensat ?

- Prédiction 1925 par S. Bose et A. Einstein.
- Découverte expérimentale 1995, Prix Nobel en 2001 pour C.E. Wieman, E.A. Cornell, W. Ketterle.



Conditions expérimentales pour obtenir des condensats :

- ✓ Gaz mono-atomique ,
- ✓ Température de l'ordre du nano degré Kelvin,
- ✓ Quelques milliers d'atomes.

Remarque : expériences complexes & coûteuses

Equation de Gross-Pitaevskii adimensionnée

- Hypothèses :
 - Température très basse
 - Collisions à très basse énergie
 - Confinement dans un piège magnétique noté $V(\mathbf{x})$
 - Moment angulaire ΩL_z

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) + \beta|\psi(\mathbf{x},t)|^2 - \Omega L_z \right)\psi(\mathbf{x},t)$$

$$\|\psi(.,t)\|^2 := \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x},t)|^2 d\mathbf{x} = 1 \quad \mathbf{L}_z = -i(x\partial_y - y\partial_x)$$

Equation de Gross-Pitaevskii adimensionnée

- Hypothèse : état stationnaire

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\mu t} \phi(\mathbf{x})$$

(μ, ϕ) sont obtenus par résolution d'un problème aux valeurs propres non linéaire tel que :

$$\mu\phi(\mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{x}) + \beta|\phi(\mathbf{x})|^2 - \Omega L_z \right) \phi(\mathbf{x})$$

Avec :

$$\|\phi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |\phi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

Equation de Gross-Pitaevskii adimensionnée

- Hypothèse : états stationnaires

$$\mu\phi = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \mathbf{V} + \beta|\phi|^2 - \Omega\mathbf{L}_z \right)\phi$$

Qui peut s'écrire également :

$$E(\phi) = \int_{\mathbb{R}^3} \left[\left(\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + \mathbf{V} |\phi|^2 + \frac{1}{2} \beta |\phi|^4 - \Omega \Re(\phi^* \mathbf{L}_z \phi) \right) \right] d\mathbf{x}$$

Si on minimise E , on obtient les états stationnaires nommés :
« Ground State »

Ground State solution

- Existence de la solution :
 - **R. Seiringer** « *Gross-Pitaevskii theory of the rotating Bose gas* », *Comm. Math. Phys.* 2002.
 - **Bao et.al** « *Ground, symmetric and central vortex states in rotating Bose-Einstein condensates* », *Comm. Math. Sci* 2005

L'existence du « ground state » dépend d'un rapport entre $|\Omega|$ et la forme de $V(\mathbf{x})$

Méthode numérique

Descente de gradient :

$$\mu\phi = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \mathbf{V} + \beta|\phi|^2 - \Omega\mathbf{L}_z \right)\phi$$

Soit :

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial \tau}(\mathbf{x}, \tau) = -\nabla E(v) \\ \nabla E(v) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \mathbf{V} + \beta|v|^2 - \Omega\mathbf{L}_z \right)v \end{cases}$$

$$v(\mathbf{x}, \tau) \leftarrow \frac{v(\mathbf{x}, \tau)}{\|v(\cdot, \tau)\|_{L_2}} \quad \|v(\mathbf{x}, 0)\|_{L_2} = 1 \quad \phi(\mathbf{x}) = \lim_{(\tau \rightarrow \infty)} v(\mathbf{x}, \tau)$$

Méthode numérique

- Descente de gradient

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \tau} = - \left(-\frac{1}{2}\Delta + \mathbf{V} + \beta |\mathbf{v}|^2 - \Omega \mathbf{L}_z \right) \mathbf{v}$$

Euler semi-implicite

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta \tau} = \frac{1}{2} \Delta \mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{V} \mathbf{v}^{n+1} - \beta |\mathbf{v}^n|^2 \mathbf{v}^{n+1} - \Omega \mathbf{L}_z \mathbf{v}^{n+1}$$

$$\begin{cases} \mathbf{A} \mathbf{v}^* = \mathbf{b} \\ \mathbf{v}^{n+1} = \frac{\mathbf{v}^*}{\|\mathbf{v}^*\|} \end{cases}$$

$$\mathbf{A} = \left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta \tau} - \frac{1}{2} \Delta + \mathbf{V} + \beta |\mathbf{v}^n|^2 - \Omega \mathbf{L}_z \right)$$

$$\mathbf{b} = \frac{\mathbf{v}^n}{\Delta \tau}$$

Méthode numérique

- Descente de gradient améliorée

$$\mathbf{A} = \left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta\tau} - \frac{1}{2}\Delta + \mathbf{V} + \beta|\mathbf{v}^n|^2 - \Omega\mathbf{L}_z \right)$$

Les opérateurs « Laplacien » et « Rotationnel » sont discrétisés à l'aide de FFT.

X. Antoine et R. Duboscq (J. Comput. Phys 2013) proposent d'utiliser une méthode de Krylov (BiCGStab) et un pré-conditionnement de A tel que le problème à résoudre devienne :

$$(\mathbf{I} + \mathbf{P}\mathbf{A}_{TF})\mathbf{v}^* = \mathbf{P}\mathbf{b}$$

$$\mathbf{P} = \left(\frac{\mathbf{I}}{\Delta\tau} + \mathbf{V} + \beta|\mathbf{v}^n|^2 \right)^{-1}$$

$$\mathbf{A}_{TF} = -\frac{1}{2}\Delta - \Omega\mathbf{L}_z$$

Mise en œuvre :

Avantages :

Facile à implémenter. Fortran, programmation hybride(MPI-OpenMP) pour le cas 3D et OpenMP pour le cas 2D ;

Bon passage à l'échelle ;

Robuste ;

Rapide.

Inconvénients :

FFT + moment angulaire -> CL périodique

Choix de $\Delta\tau$

Condition initiale

Choix de la condition initiale important .

Bao et.al « Ground, symmetric and central vortex states in rotating Bose-Einstein condensates », *Comm. Math. Sci* 2005

Hypothèse : Terme non linéaire fort $\beta |v^n|^2$, avec $\beta \geq 10$

Régime de Thomas-Fermi

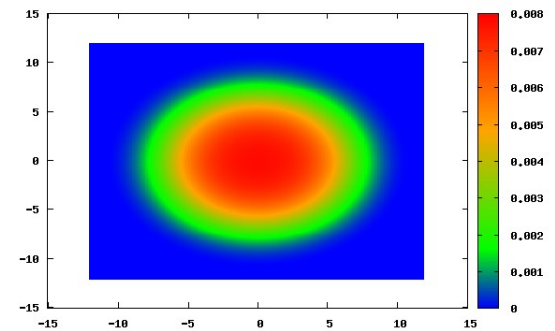
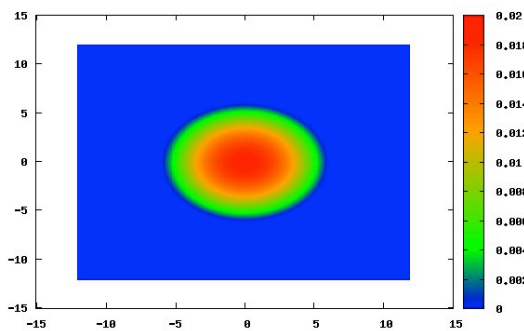
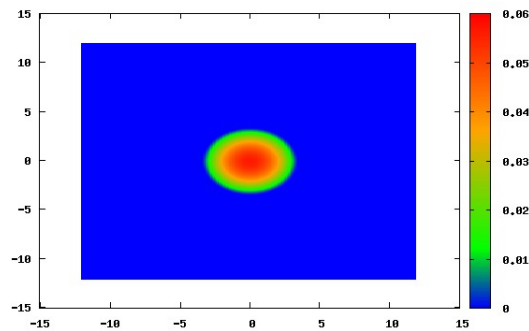
$$v_0(\mathbf{x}) = \frac{v_g^{tf}(\mathbf{x})}{\|v_g^{tf}\|}, \quad v_g^{tf}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu_g^{tf} - V(\mathbf{x})}{\beta}} \\ 0 \end{cases}$$

$V(\mathbf{x}) = (\sum_{i=1,n} \gamma_i x_i^2), \quad n = 2 \text{ (cas 2D)}, 3 \text{ (cas 3D)}$

$$\mu_g^{tf} = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{4\beta\gamma_1\gamma_2 / \pi}, \text{ pour le cas 2D} \\ \frac{1}{2} (15\beta\gamma_1\gamma_2\gamma_3 / 4\pi)^{2/5}, \text{ pour le cas 3D} \end{cases}$$

Condition initiale

$$v_0(\mathbf{x}) = \frac{v_g^{tf}(\mathbf{x})}{\|v_g^{tf}\|}, \quad v_g^{tf}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\mu_g^{tf} - V(\mathbf{x})}{\beta}} \\ 0 \end{cases} \quad \mu_g^{tf} = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{4\beta\gamma_1\gamma_2 / \pi}, \text{ pour le cas 2D} \\ \frac{1}{2} (15\beta\gamma_1\gamma_2\gamma_3 / 4\pi)^{\frac{2}{5}}, \text{ pour le cas 3D} \end{cases}$$



$$\gamma_1 = \gamma_2 = 1.$$

$$\beta = 100.$$

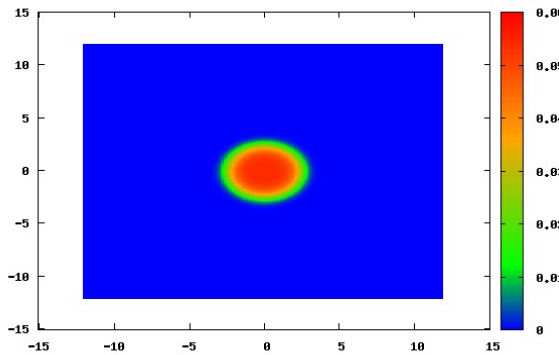
$$\beta = 1000.$$

$$\beta = 10000.$$

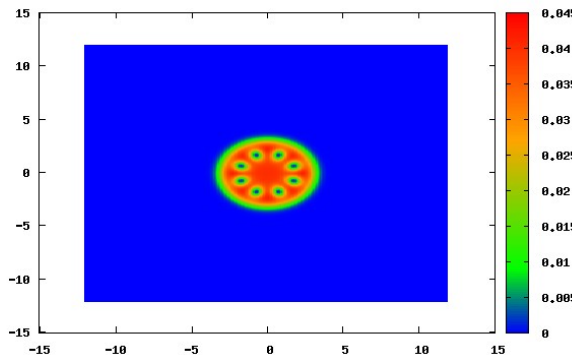
Quelques résultats 2D

Résolution : 256x256

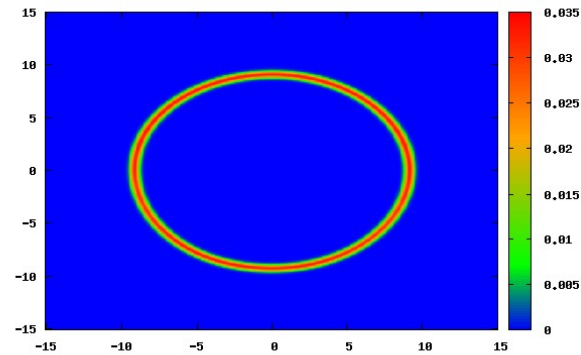
Résolution : 512x512



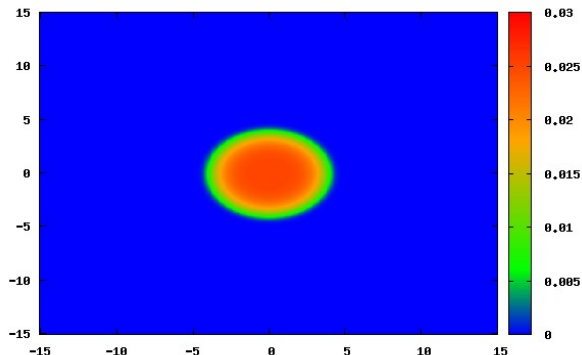
$\beta = 100.$; $\Omega = 0.1$



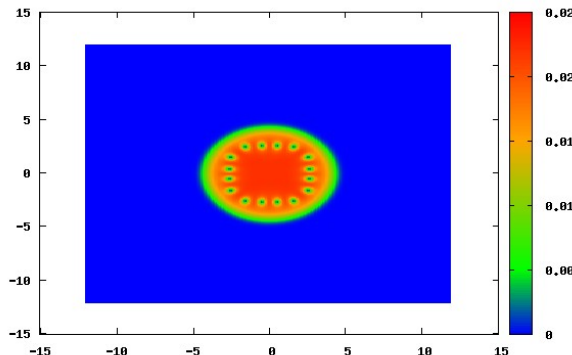
$\beta = 100.$; $\Omega = 1.0$



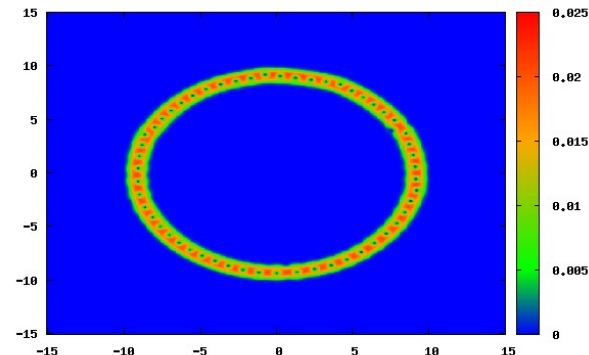
$\beta = 100.$; $\Omega = 5.0$



$\beta = 1000.$; $\Omega = 0.1$



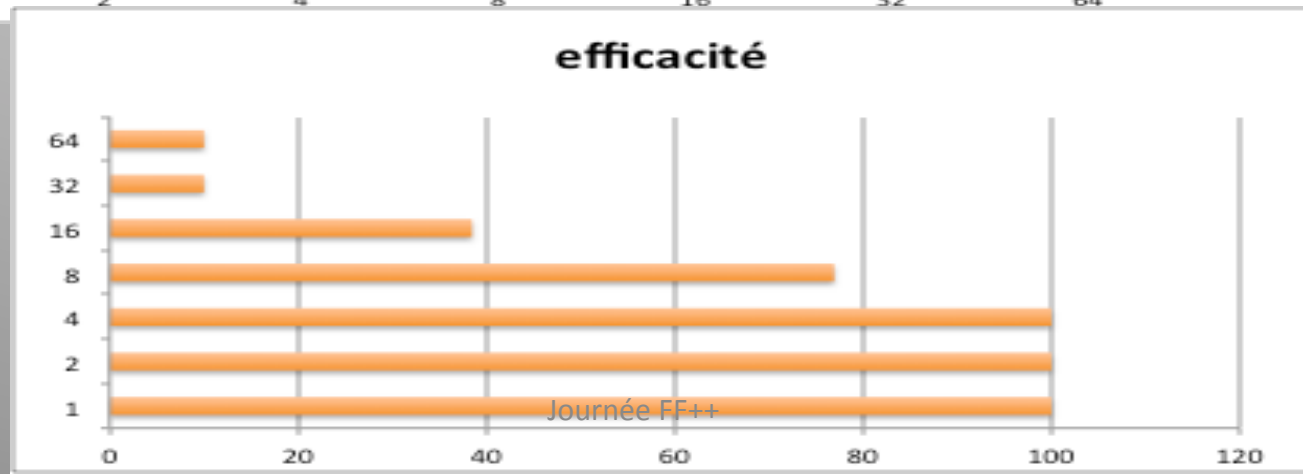
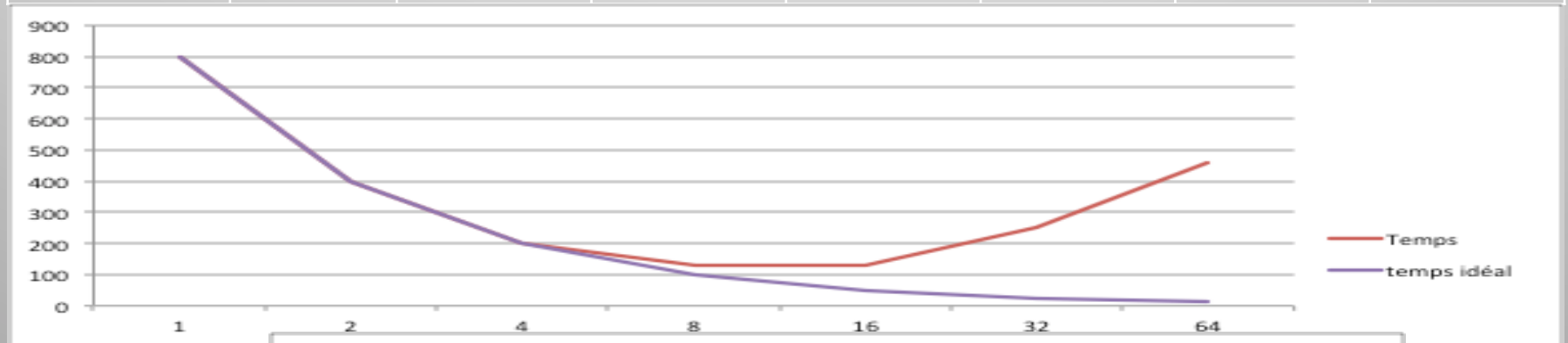
$\beta = 1000.$; $\Omega = 1.0$



$\beta = 1000.$; $\Omega = 5.0$

Efficacité du code en 2D OpenMP

Nb coeurs	1	2	4	8	16	32	64
Temps secondes	800	400	200	130	130	250	460



Ne pas mettre OpenMP à la poubelle

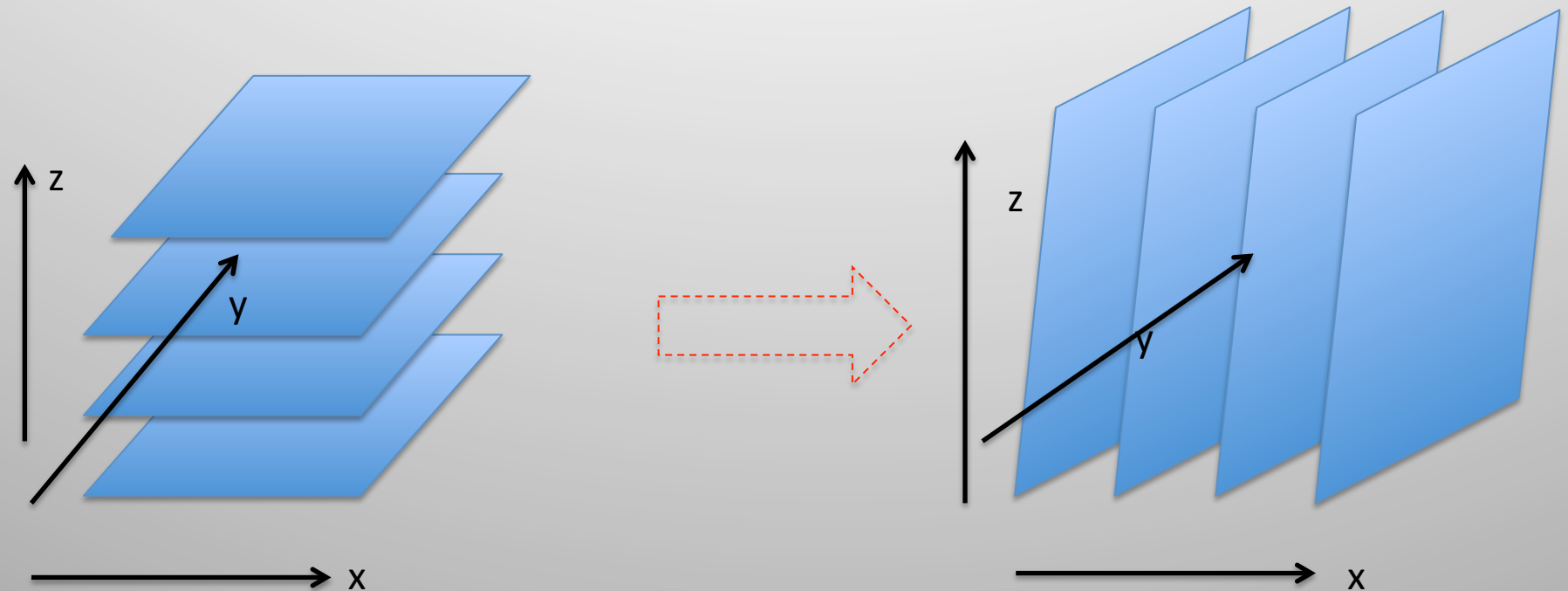
UV-100

	Mono	1	2	4	8	16	32	64	128
mpi	2175	1220	609	345	236	117	58	29	13
CG	2175	790	381	234	195	103	74	69	41
FG	2175	785	384	236	194	131	309	514	475
Ideal	2175	1087	543	271	135	33	16	8	4

UV-2000

#cœurs	mpi	omcg	omfg
2	190,45	189,30	190,81
4	125,12	123,75	124,65
8	120,00	119,39	120,32
16	60,05	59,80	142,62
32	30,21	30,02	225,70
64	15,32	15,18	235,45
128	6,16	6,12	185,05
256	1,03	1,78	35,91
512	0,64	1,47	5,56
1024	0,56	4,12	10,72

Version 3D : MPI/OpenMP



Le moment angulaire nous oblige à ce découpage

Inconvénient : MPI pure Nombre processus == N_z !

Solution : Open MP + architecture SMP +Cluster !

Version optimisée d'OpenMP.

Version avec OpenACC.

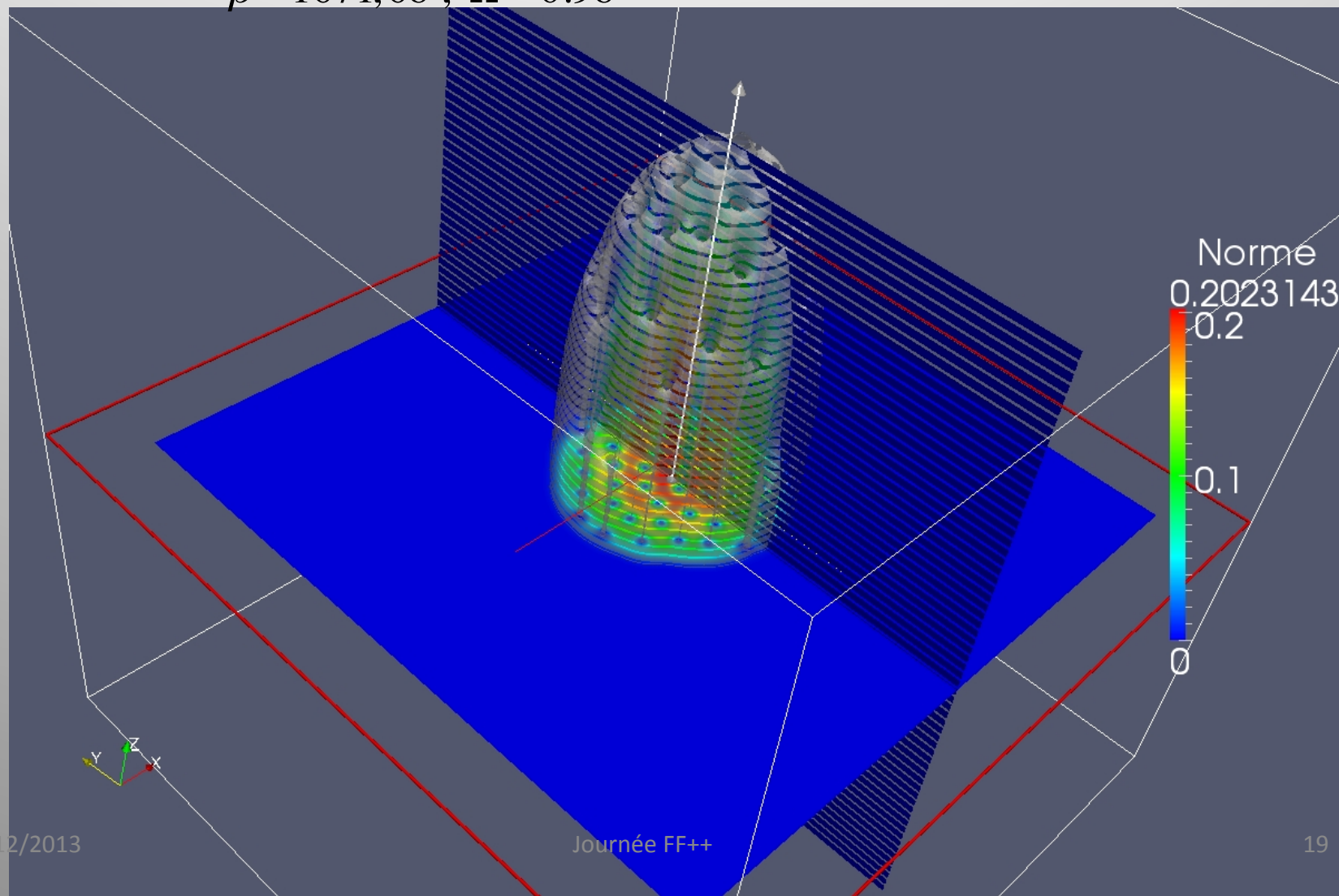
Bibliothèque(s) obligatoire(s) (2D) : FFTW. (3D) : FFTW, MPI.

Option pour IO : ADIOS/HDF5

Quelques résultats 3D

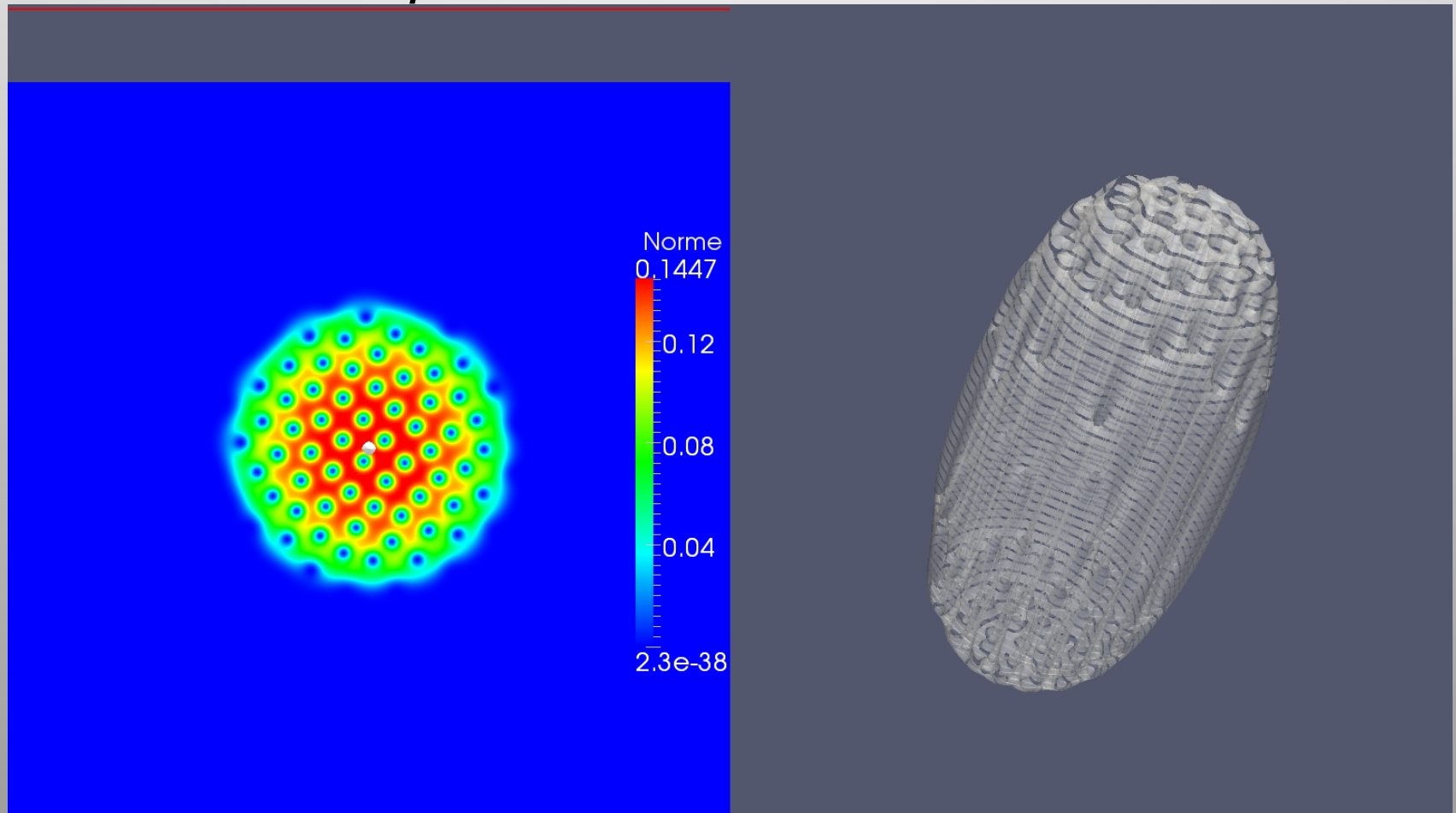
$\beta = 1671,68$; $\Omega = 0.98$

Résolution : 256x256x256



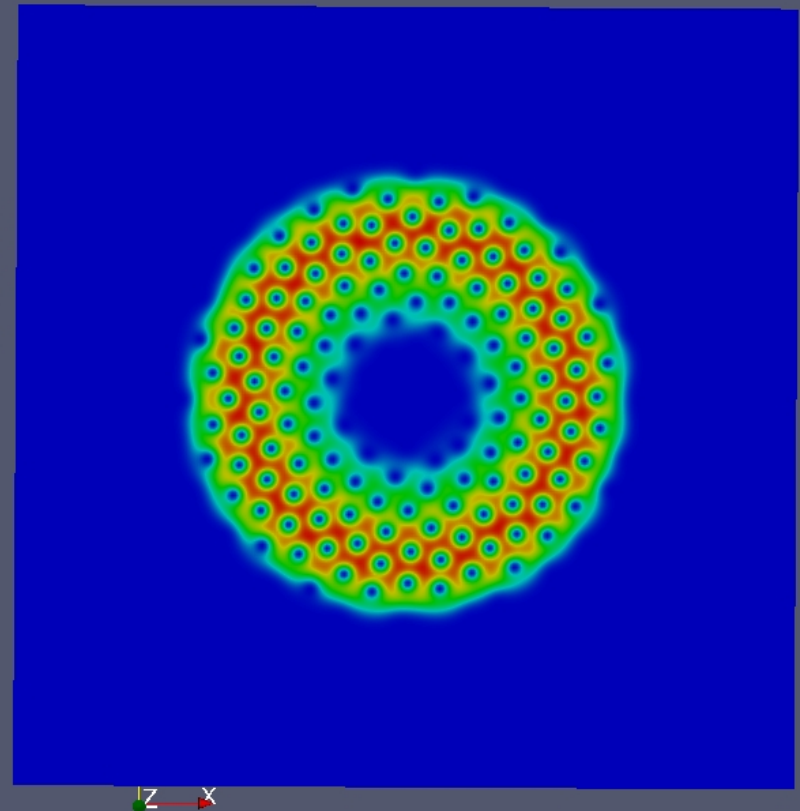
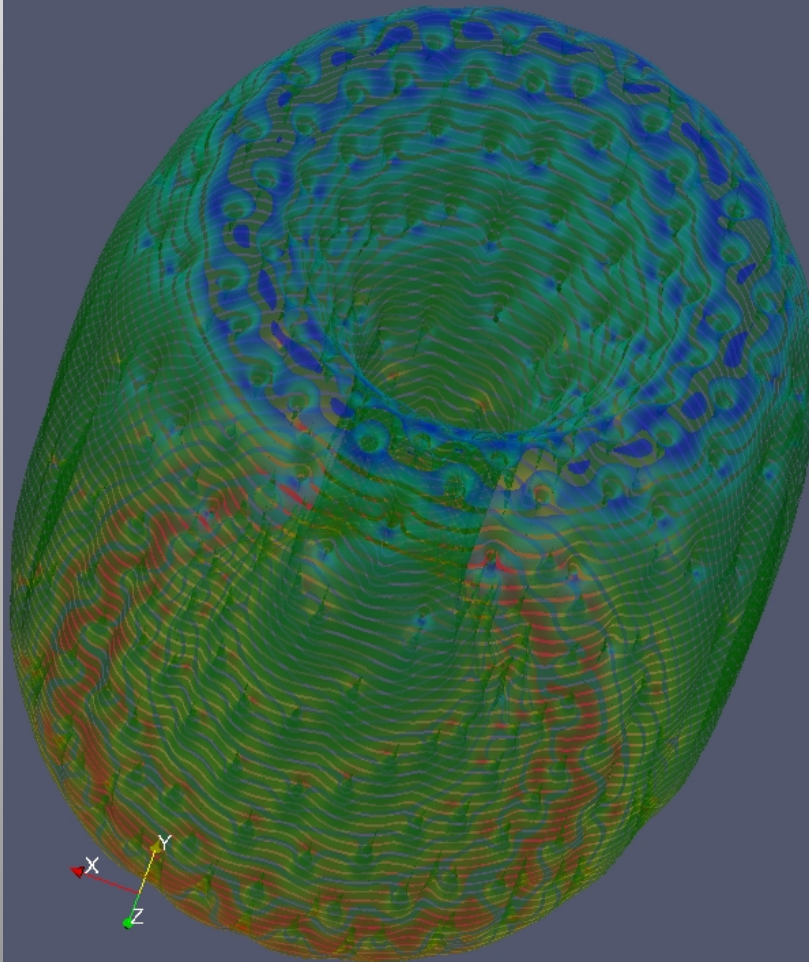
Quelques résultats 3D

$$\beta = 1671,68 ; \Omega = 1.01$$



Quelques résultats 3D

$$\beta = 1671,68 ; \Omega = 1.08$$



Quelques résultats 3D

$$\beta = 1671,68 ; \Omega = 1.11$$

