Méthodes numériques et simulation de condensats de Bose-Einstein

Guillaume Vergez

Directeur :

Ionut Danaila

Laboratoire de Mathématiques

Raphaël Salem, Rouen

Co-directeur :

Frédéric Hecht

Laboratoire Jacques-Louis Lions

Université Pierre et Marie Curie

11 décembre, 2013

Introduction

- Théorie : 1925, Einstein.
  $\Longrightarrow$ Gaz de particules refroidi (quelques nanokelvins), condensation d'une partie macroscopique du gaz, état de plus faible énergie, oscillation selon la même fonction d'onde ψ.

Introduction

- Théorie : 1925, Einstein.
  $\Longrightarrow$ Gaz de particules refroidi (quelques nanokelvins), condensation d'une partie macroscopique du gaz, état de plus faible énergie, oscillation selon la même fonction d'onde ψ.
- Expériences :
  1. 1995, E. A. Cornell, W. Ketterle et Carl E. Wieman.
     $\Longrightarrow$ Prix Nobel de 2001.

Introduction

- Théorie : 1925, Einstein.
  $\Longrightarrow$ Gaz de particules refroidi (quelques nanokelvins), condensation d'une partie macroscopique du gaz, état de plus faible énergie, oscillation selon la même fonction d'onde ψ.
- Expériences :
  1. 1995, E. A. Cornell, W. Ketterle et Carl E. Wieman.
     $\Longrightarrow$ Prix Nobel de 2001.
  2. 1999, C. Raman et ses collaborateurs.
     $\Longrightarrow$ existence de courants permanents dans le condensat.

Introduction

- Théorie : 1925, Einstein.
  $\Longrightarrow$ Gaz de particules refroidi (quelques nanokelvins), condensation d'une partie macroscopique du gaz, état de plus faible énergie, oscillation selon la même fonction d'onde ψ.

- Expériences :
  1. 1995, E. A. Cornell, W. Ketterle et Carl E. Wieman.
     $\Longrightarrow$ Prix Nobel de 2001.
  2. 1999, C. Raman et ses collaborateurs.
     $\Longrightarrow$ existence de courants permanents dans le condensat.
  3. 2000, K. W. Madison et 2001, J. R. Abo-Shaeer.
     $\Longrightarrow$ apparition de vortex quantiques dans le condensat en rotation.

Introduction

- Théorie : 1925, Einstein.
  $\Longrightarrow$ Gaz de particules refroidi (quelques nanokelvins), condensation d'une partie macroscopique du gaz, état de plus faible énergie, oscillation selon la même fonction d'onde ψ.
- Expériences :
  1. 1995, E. A. Cornell, W. Ketterle et Carl E. Wieman.
     $\Longrightarrow$ Prix Nobel de 2001.
  2. 1999, C. Raman et ses collaborateurs.
     $\Longrightarrow$ existence de courants permanents dans le condensat.
  3. 2000, K. W. Madison et 2001, J. R. Abo-Shaeer.
     $\Longrightarrow$ apparition de vortex quantiques dans le condensat en rotation.
  4. En cours, Groupe Atoms Froids du laboratoire Kastler-Brossel (LKB) de l'Ecole Normale Supérieure.

Introduction

- Théorie : 1925, Einstein.
  $\Longrightarrow$ Gaz de particules refroidi (quelques nanokelvins), condensation d'une partie macroscopique du gaz, état de plus faible énergie, oscillation selon la même fonction d'onde ψ.
- Expériences :
  1. 1995, E. A. Cornell, W. Ketterle et Carl E. Wieman.
     $\Longrightarrow$ Prix Nobel de 2001.
  2. 1999, C. Raman et ses collaborateurs.
     $\Longrightarrow$ existence de courants permanents dans le condensat.
  3. 2000, K. W. Madison et 2001, J. R. Abo-Shaeer.
     $\Longrightarrow$ apparition de vortex quantiques dans le condensat en rotation.
  4. En cours, Groupe Atoms Froids du laboratoire Kastler-Brossel (LKB) de l'Ecole Normale Supérieure.
- Modélisation numérique : Projet BECASIM.
  Mise en rotation selon l'axe des z du condensat de Bose-Einstein (BEC).

Plan

1. Energie de Gross-Pitaevskii (GP) et equation de GP stationnaire
2. Différentes méthodes
   - La méthode de gradient de Sobolev (GS)
   - Adaptation de maillage
   - Utilisation de Ipopt
3. Cas tests de comparaison
4. Construction d'approximations de départ
   - Ipopt axisymétrique sans vortex ($\Omega = 0$)
   - Ipopt axisymétrique avec vortex ($\Omega \neq 0$)
5. Quelques résultats en 3D

Outline

Soit $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^3$ un domaine ouvert, borné.
La fonction d'onde du BEC est le minimiseur u dans $H^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$ de l'énergie de Gross-Pitaevskii :

$$E(u) = \int_{\mathcal{D}} \left[\frac{1}{2} |\nabla u|^2 + V_{trap} |u|^2 + \frac{1}{2} C_g |u|^4 \right] - C_\Omega L_z, \qquad (1)$$

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

$V_{trap} = \dfrac{1}{2}(a_x x^2 + a_y y^2 + a_z z^2)$ (potentiel de piégeage harmonique)

ou $V_{trap} = \dfrac{1}{2}(a_x x^2 + a_y y^2 + a_z z^2 + a_4 r^4)$ (potentiel quartique/quadratique)

et

$$L_z = -\int_{\mathcal{D}} \mathcal{I}m \left[\overline{u} \left(y \frac{\partial u}{\partial x} - x \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] = \int_{\mathcal{D}} \mathcal{R}e \left[i \overline{u} \left(y \frac{\partial u}{\partial x} - x \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right]. \qquad (2)$$

La fonction d'onde u est normalisée et la conservation du nombre d'atomes s'écrit :

$$\int_{\mathcal{D}} |u|^2 = 1. \tag{3}$$

Ceci revient à résoudre l'équation de GP stationnaire

$$-\frac{1}{2}\Delta u + V_{trap} u + C_g |u|^2 u - iC_\Omega (A^T \nabla) u = \mu u, \tag{4}$$

où

$$A = \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$\text{et} \quad \mu \text{ est le potentiel chimique (un multiplicateur de Lagrange).} \tag{6}$$

Outline

1. Energie de Gross-Pitaevskii (GP) et equation de GP stationnaire
2. Différentes méthodes
   - La méthode de gradient de Sobolev (GS)
   - Adaptation de maillage
   - Utilisation de Ipopt
3. Cas tests de comparaison
4. Construction d'approximations de départ
   - Ipopt axisymétrique sans vortex ($\Omega = 0$)
   - Ipopt axisymétrique avec vortex ($\Omega \neq 0$)
5. Quelques résultats en 3D

1. Méthodes existantes sous FreeFem++
   - Méthode de Gradient de Sobolev en éléments finies.

1. Méthodes existantes sous FreeFem++
   - Méthode de Gradient de Sobolev en éléments finies.
   - Adaptation du maillage.

1. Méthodes existantes sous FreeFem++
    - Méthode de Gradient de Sobolev en éléments finies.
    - Adaptation du maillage.
    - Utilisation de Ipopt.

1. Méthodes existantes sous FreeFem++
   - Méthode de Gradient de Sobolev en éléments finies.
   - Adaptation du maillage.
   - Utilisation de Ipopt.
   - Méthode de propagation en temps imaginaire, schéma hibride Runge-Kutta/ Crank-Nicolson.

1. Méthodes existantes sous FreeFem++
   - Méthode de Gradient de Sobolev en éléments finies.
   - Adaptation du maillage.
   - Utilisation de Ipopt.
   - Méthode de propagation en temps imaginaire, schéma hibride Runge-Kutta/ Crank-Nicolson.

1. Méthodes existantes sous FreeFem++
    - Méthode de Gradient de Sobolev en éléments finies.
    - Adaptation du maillage.
    - Utilisation de Ipopt.
    - Méthode de propagation en temps imaginaire, schéma hibride Runge-Kutta/ Crank-Nicolson.
2. Méthodes en cours de developpement sous FreeFem++
    - Méthode de Gradient de Sobolev avec discrétisation spéctrale en espace.

1. Méthodes existantes sous FreeFem++
   - Méthode de Gradient de Sobolev en éléments finies.
   - Adaptation du maillage.
   - Utilisation de Ipopt.
   - Méthode de propagation en temps imaginaire, schéma hibride Runge-Kutta/ Crank-Nicolson.
2. Méthodes en cours de developpement sous FreeFem++
   - Méthode de Gradient de Sobolev avec discrétisation spéctrale en espace.
   - Méthode de Newton pénalisée.

La méthode de gradient de Sobolev (GS)

- Méthode de minimisation directe de l'énergie :

$$u_{n+1} = u_n + \rho \, \mathcal{G}_n, \tag{7}$$

$\mathcal{G}_n$: Direction de descente ($D_{u_n} E . \mathcal{G}_n < 0$)
ρ : Pas de descente.

La méthode de gradient de Sobolev (GS)

- Méthode de minimisation directe de l'énergie :

$$u_{n+1} = u_n + \rho\, \mathcal{G}_n, \tag{7}$$

  $\mathcal{G}_n$: Direction de descente $(D_{u_n}E.\mathcal{G}_n < 0)$
  ρ : Pas de descente.
- Méthode de gradient de Sobolev $\Longrightarrow \mathcal{G}_n = -\nabla E(u_n)$.

La méthode de gradient de Sobolev (GS)

- Méthode de minimisation directe de l'énergie :

$$u_{n+1} = u_n + \rho\, \mathcal{G}_n, \tag{7}$$

  $\mathcal{G}_n$: Direction de descente $(D_{u_n}E.\mathcal{G}_n < 0)$
  ρ : Pas de descente.
- Méthode de gradient de Sobolev $\Longrightarrow \mathcal{G}_n = -\nabla E(u_n)$.
- Plusieurs manières de définir ce gradient, selon l'espace de Hilbert dans lequel on travaille et le produit scalaire que l'on considère.

La méthode de gradient de Sobolev (GS)

- Méthode de minimisation directe de l'énergie :

$$u_{n+1} = u_n + \rho \, \mathcal{G}_n, \tag{7}$$

$\mathcal{G}_n$: Direction de descente $(D_{u_n} E . \mathcal{G}_n < 0)$
ρ : Pas de descente.

- Méthode de gradient de Sobolev $\Longrightarrow \mathcal{G}_n = -\nabla E(u_n)$.
- Plusieurs manières de définir ce gradient, selon l'espace de Hilbert dans lequel on travaille et le produit scalaire que l'on considère.
- I. Danaila et P.Kazemi $\Longrightarrow$ nouveau produit scalaire sur $H^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$:

$$\langle u, v \rangle_{H_A} = \int_{\mathcal{D}} uv + \underbrace{(\nabla u + i\Omega A^T u)}_{\nabla_{H_A} u} \cdot (\nabla v + i\Omega A^T v).$$

La méthode de gradient de Sobolev (GS)

- Méthode de minimisation directe de l'énergie :

$$u_{n+1} = u_n + \rho\, \mathcal{G}_n, \tag{7}$$

$\mathcal{G}_n$: Direction de descente $(D_{u_n}E.\mathcal{G}_n < 0)$
ρ : Pas de descente.

- Méthode de gradient de Sobolev $\Longrightarrow \mathcal{G}_n = -\nabla E(u_n)$.
- Plusieurs manières de définir ce gradient, selon l'espace de Hilbert dans lequel on travaille et le produit scalaire que l'on considère.
- I. Danaila et P.Kazemi $\Longrightarrow$ nouveau produit scalaire sur $H^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$:

$$\langle u, v\rangle_{H_A} = \int_{\mathcal{D}} uv + \underbrace{(\nabla u + i\Omega A^T u)}_{\nabla_{H_A} u} \cdot (\nabla v + i\Omega A^T v).$$

- Possibilité d'adaptation du pas de temps ρ.

La méthode de gradient de Sobolev (GS)

- Méthode de minimisation directe de l'énergie :

$$u_{n+1} = u_n + \rho \, \mathcal{G}_n, \tag{7}$$

$\mathcal{G}_n$: Direction de descente $(D_{u_n} E.\mathcal{G}_n < 0)$
ρ : Pas de descente.

- Méthode de gradient de Sobolev $\Longrightarrow \mathcal{G}_n = -\nabla E(u_n)$.
- Plusieurs manières de définir ce gradient, selon l'espace de Hilbert dans lequel on travaille et le produit scalaire que l'on considère.
- I. Danaila et P.Kazemi $\Longrightarrow$ nouveau produit scalaire sur $H^1(\mathcal{D}, \mathbb{C})$:

$$\langle u, v \rangle_{H_A} = \int_{\mathcal{D}} uv + \underbrace{(\nabla u + i\Omega A^T u)}_{\nabla_{H_A} u} \cdot (\nabla v + i\Omega A^T v).$$

- Possibilité d'adaptation du pas de temps ρ.
- Autre produit scalaire possible :

$$\langle u, v \rangle_{H_\lambda} = \langle u, v \rangle_{L^2} + \lambda \langle u, v \rangle_{H^1}.$$

Adaptation de maillage

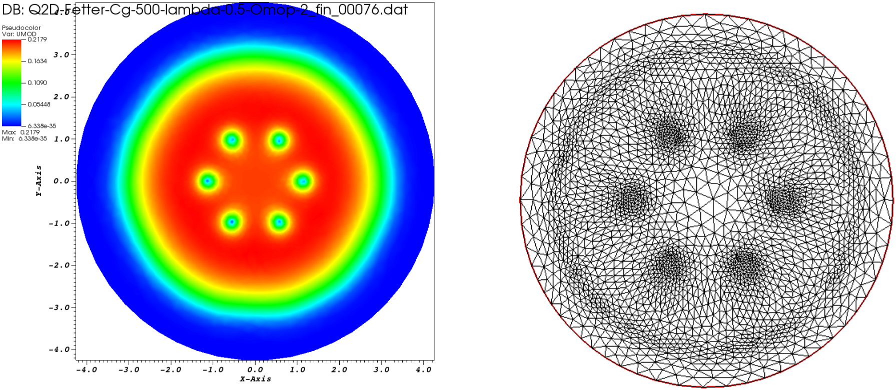


Figure: Solution renvoyée par gradient de Sobolev (à gauche), Maillage adapté (à droite)

Utilisation de Ipopt

- Optimiseur développé par Andreas Wächter at Carl Laird.
- Utilisation d'une méthode de points milieux (article de J. Nocedal et Waltz (2008) et thèse de Wächter (January 2002)).
- Sous FreeFem++, disponible dans la bibliothèque ff-Ipopt.

Utilisation de Ipopt

- Optimiseur développé par Andreas Wächter at Carl Laird.
- Utilisation d'une méthode de points milieux (article de J. Nocedal et Waltz (2008) et thèse de Wächter (January 2002)).
- Sous FreeFem++, disponible dans la bibliothèque ff-Ipopt.

Il a été conçu pour résoudre des problèmes de minimisation sous contrainte de la forme :

$$\text{trouver } x_0 = \underset{x \in \mathbb{R}^n}{\text{argmin}}(f(x)) \tag{8}$$

$$\text{tel que } \begin{cases} \forall i \leq n,\ x_i^{lb} \leq x_i \leq x_i^{ub} \text{ (bornes simples)} \\ \forall i \leq m,\ c_i^{lb} \leq c(x_i) \leq c_i^{ub} \text{ (fonctions de contraintes)} \end{cases} \tag{9}$$

- Arguments d'entrée :
  1. La fonctionnelle à minimiser, son gradient et sa matrice hessienne.
  2. La fonctionnelle définissant la contrainte, sa matrice Jacobienne et les bornes supérieures et inférieures.
  3. Une tolérance d'erreur pour approcher la solution.

- F.Hecht a écrit un programme sous FreeFem++ qui utilise Ipopt. On approche de plus en plus précisément la solution en diminuant progressivement la tolérance demandée, et on raffine le maillage à chaque fois qu'on atteint un nouveau seuil de tolérance.

Outline

Potentiel harmonique avec $a_x = a_y = 1$, $C_\Omega = 0.4$ et $C_g = 500$.

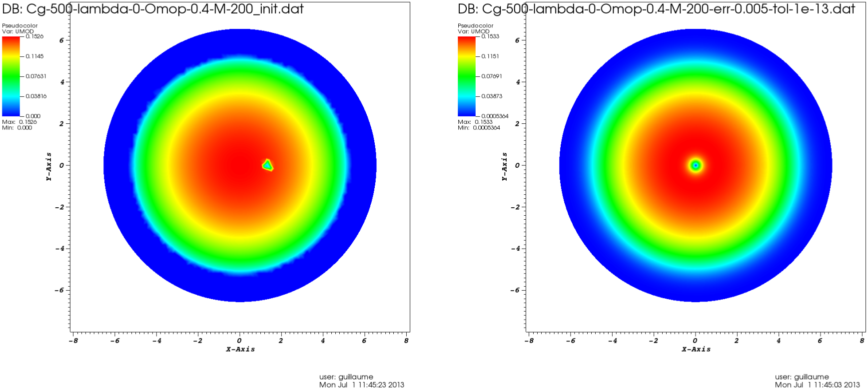


Figure: Profil de densité de la solution initiale à gauche et finale à droite.

Comparaison pour un potentiel harmonique

Méthode	Tol	Err	CPU	E	$E_{Ip} - E_{G_A}$
Grad de Sob	1e-9	0.1	122.08s	8.36886	
Ipopt	0.001	0.1	74.51s	8.36249	-0.00548127
	1e-09	0.02	127.04s	8.36134	-0.00663453
	1e-13	0.005	180.29s	8.36092	-0.00705049

Potentiel quartique avec avec $a_x = a_y = 1$ et $a_4 = 0.5$, $C_\Omega = 2$ et $C_g = 500$.

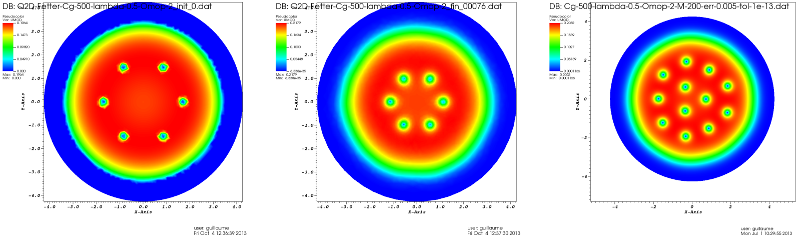


Figure: Approximation initiale (à gauche), Solution renvoyée par gradient de Sobolev (au centre), Solution renvoyée par Ipopt (à droite)

Comparaison pour un potentiel quartique+quadratique

Méthode	Tol	Err	CPU	E	$E_{Ip} - E_{G_A}$
Grad de Sob	1e-6	0.1	30.52s	11.8767	
Ipopt	0.001	0.1	14.11s	11.9505	0.0737989
	1e-05	0.1	76.71s	11.5873	-0.289404
	1e-12	0.01	2499.95s	11.0525	-0.824204

Outline

Ipopt axisymétrique sans vortex ($\Omega = 0$)

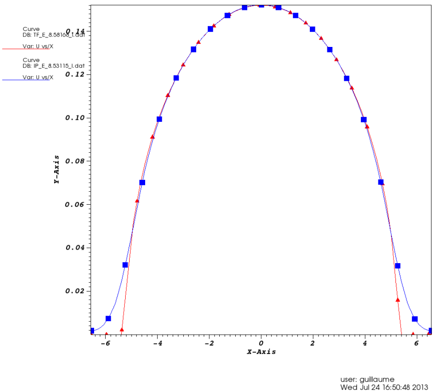
Plutôt que de faire une approximation de Thomas-Fermi pour la solution approchée initiale, une idée est de trouver une solution axisymétrique du problème avec Ipopt ($\frac{\partial u}{\partial \theta} = 0$). La fonctionelle devient :

$$E(u) = \int_0^{R_{max}} 2\pi \left[\frac{1}{2} |\frac{\partial u}{\partial r}|^2 + C_{trap}|u|^2 + \frac{1}{2} C_g |u|^4 \right] rdr, \qquad (10)$$

La contrainte devient :

$$C(u) = \int_0^{R_{max}} 2\pi |u|^2 rdr = 1. \qquad (11)$$

Condition initiale \ Potentiel	Harmonique	Quartique
Thomas-Fermi	E = 8.58168	E = 18.129
Ipopt axisymétrique	E = 8.53115	E = 17.9123



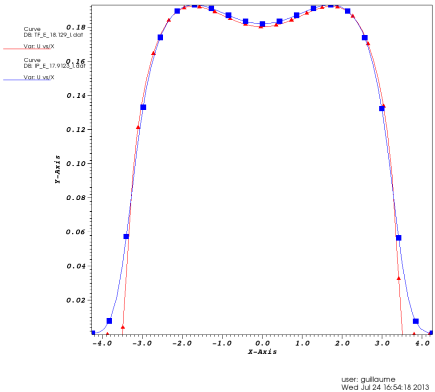


Figure: Comparaison de Thomas-Fermi ▲ et de Ipopt ■ pour un potentiel harmonique (à gauche) et quartique+quadratique (à droite).

Ipopt axisymétrique avec vortex ($\Omega \neq 0$)

- Cas test avec un potentiel harmonique et $a_x = a_y = 1$, $C_\Omega = 0.4$ et $C_g = 500$.
- m^{ieme} mode de Fourier de la solution selon la variable polaire θ.

$$u(r,\theta) = u(r)e^{im\theta}, \tag{12}$$

où m est un entier ($m = 1$ pour un vortex simple).

- On obtient alors en posant :

$$C_{eff} = C_{trap} + (\frac{m}{2r})^2 - \Omega m, \tag{13}$$

$$E(u) = \int_0^{R_{max}} 2\pi \left[\frac{1}{2}|\frac{\partial u}{\partial r}|^2 + C_{eff}|u|^2 + \frac{1}{2}C_g|u|^4\right] rdr, \tag{14}$$

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

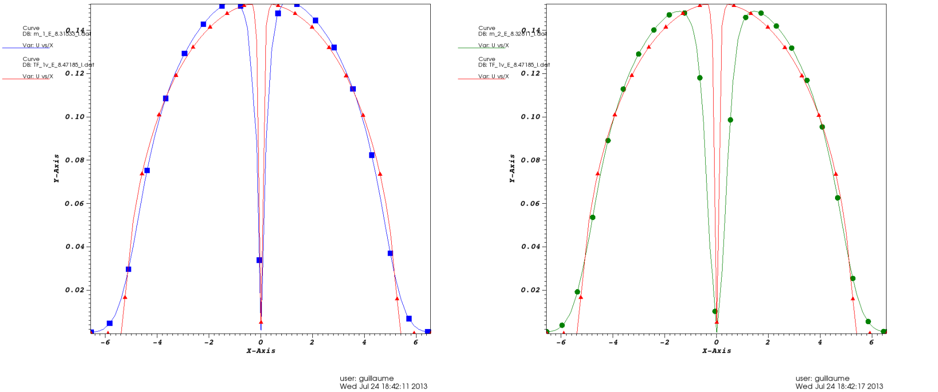


Figure: Comparaison de Thomas-Fermi ▲ et de Ipopt avec m = 1 ■ (à gauche), et de Ipopt avec m = 2 ● (à droite) pour une solution axisymétrique avec vortex central.

- Utilisation possible pour une décomposition en modes de Fourier de la solution selon la variable θ

Outline

Méthode de Gradient de Sobolev en 3D.

Test avec un potentiel harmonique $a_x = a_y = a_z = 1$, $C_g = 2500$, et $\Omega = 0.5$.

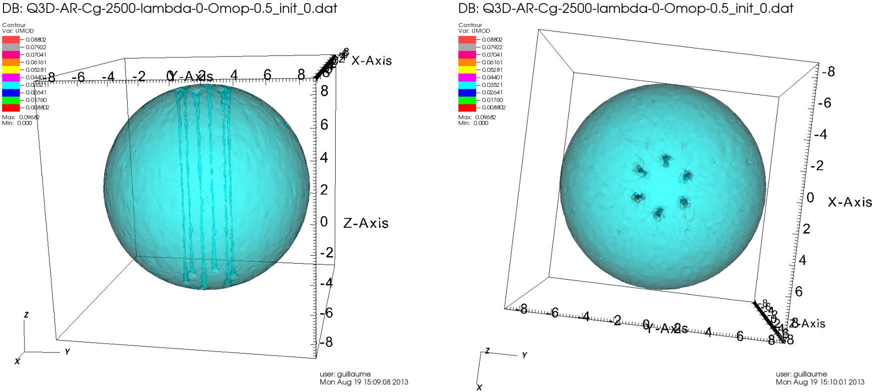


Figure: Condition initiale.

On converge en 1078 itérations et 36714.4s avec une erreur relative finale de 1e-7 et 41080 segments dans le maillage.

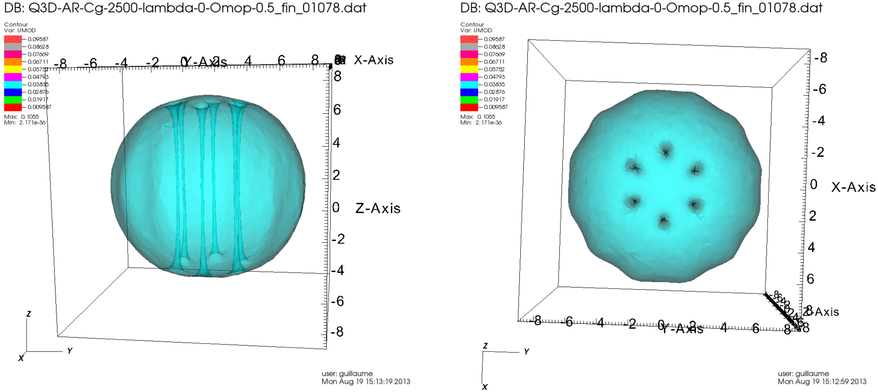


Figure: Solution finale.

Ipopt en 3D.

Test avec un potentiel quartique-quadratique avec $a_x = a_y = -0.2$, $a_z = 0.0204082$, $a_4 = 3.75$, $C_g = 1250$, et $\Omega = 0.5$. On converge en 42169.8 s pour une tolérance finale de 1e-9 et 131975 segments dans le maillage.

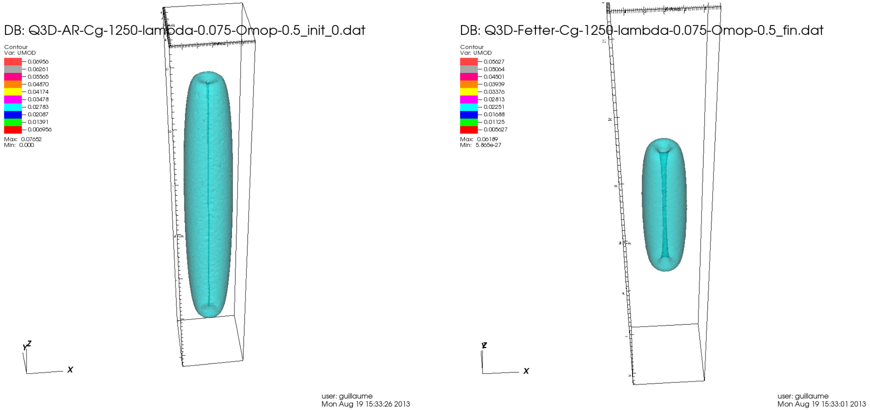


Figure: Condition initiale à gauche et solution finale à droite.

Merci pour votre attention.