

GPELab : une toolbox Matlab pour le calcul d'états stationnaires et la dynamique d'équations de Gross-Pitaevskii.

Xavier Antoine et Romain Duboscq

*Université de Lorraine
Institut Elie Cartan de Lorraine*

Workshop Freefem, 11 Décembre 2013

SOMMAIRE DE L'EXPOSÉ

CONDENSATS DE BOSE-EINSTEIN ET L'ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII

CALCUL NUMÉRIQUE D'ÉTATS STATIONNAIRES

SIMULATION DYNAMIQUE

GPELAB

INTRODUCTION AUX CONDENSATS DE BOSE-EINSTEIN

- ▶ **Condensat de Bose-Einstein (BEC)** = état de la matière se manifestant dans les gaz de bosons lorsque $T \approx 100$ nK (rubidium).
- ▶ Une grande fraction des bosons occupe alors simultanément l'état de plus basse énergie (**état fondamental**) : les atomes se **condensent** et deviennent **indissociables**.

DE LA PRÉDICTION À LA RÉALISATION

- ▶ Prédit en 1925 par **Satyendra Nath Bose** et **Albert Einstein** *via* des considérations statistiques.
- ▶ Réalisé en 1995 par une équipe de Boulder dirigée par Eric Cornell et Carl Wieman (**Prix Nobel de physique 2001** avec Wolfgang Ketterle).

ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII AVEC ROTATION

Une modélisation des condensats en rotation est donnée par l'équation de Gross-Pitaevskii :

L'équation de Gross-Pitaevskii ($d = 1, 2, 3$)

$$\begin{cases} i\partial_t\psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\Delta\psi(t, \mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}) \\ \quad + \Omega L_z\psi(t, \mathbf{x}) + \beta|\psi(t, \mathbf{x})|^2\psi(t, \mathbf{x}), \quad t \in \mathbb{R}^+, \\ \psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d. \end{cases}$$

- ▶ V (**potentiel confinant**) correspond au piège optique,
- ▶ Ω est la vitesse de rotation dans l'axe z ,
- ▶ β correspond à l'**intensité de l'interaction** entre atomes (attractive ou répulsive).

NUCLÉATION DE VORTEX QUANTIQUES

- ▶ Au sein du condensat, la dissipation de l'**énergie de rotation** va se faire *via* la **nucléation de vortex quantiques**.
- ▶ Vortex quantique = "trou" dans le condensat correspondant à une **singularité** autour de laquelle la **phase** de la fonction d'onde circule.

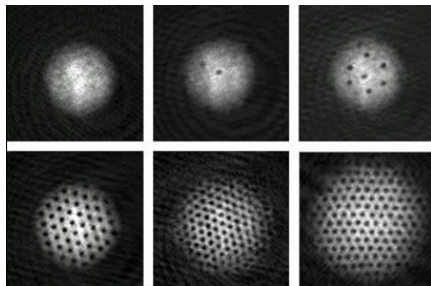


FIGURE: Arrangement de vortex en fonction de la vitesse de rotation (**réseaux d'Abrikossov**)

CHANGEMENT DE PHASE EN ROTATION RAPIDE

Lorsque l'on dépasse une certaine **vitesse critique**, la théorie prédit l'apparition d'**un vortex géant** [Rougerie, *thèse*, 2010].

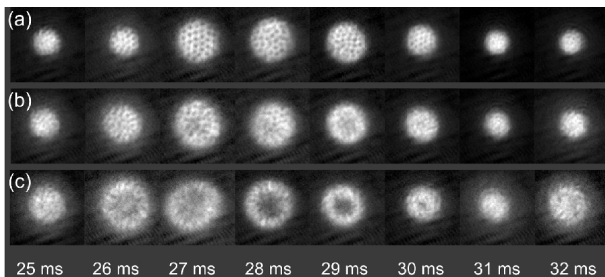


FIGURE: Début de formation du vortex géant [Stock, Bretin, Chevy & Dalibard, 2004].

CONDENSATS DE BOSE-EINSTEIN ET L'ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII

CALCUL NUMÉRIQUE D'ÉTATS STATIONNAIRES

SIMULATION DYNAMIQUE

GPELAB

CALCUL NUMÉRIQUE D'ÉTATS STATIONNAIRES

Motivations

- ▶ Importance physique : l'**état fondamental** permet d'obtenir une description du système quantique au repos.
- ▶ Importance en simulation : pour la dynamique, on se sert des états stationnaires comme **donnée initiale** que l'on perturbe.

ÉTATS STATIONNAIRES

- Pour une équation de Schrödinger

$$i\partial_t\psi(t, \mathbf{x}) = \mathcal{H}\psi(t, \mathbf{x}),$$

un **état stationnaire** est une fonction propre de l'opérateur \mathcal{H} . Pour ϕ une fonction propre de valeur propre μ , un état stationnaire de **Gross-Pitaevskii** est tel que

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

- ϕ est aussi **un point critique** de la **fonctionnelle énergie** \mathcal{E} associée à l'opérateur \mathcal{H} par la relation

$$D_{\phi^*}\mathcal{E}(\phi) = \mathcal{H}\phi,$$

sous la contrainte $\|\phi\|_{L^2} = \int_{\mathbb{R}^d} |\phi(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1$.

UNE APPROCHE POUR LE CALCUL D'ÉTATS STATIONNAIRES : LA MÉTHODE *imaginary time*

- La **méthode CNGF** (basée sur la recherche de points critiques) est une méthode de gradient avec projection qui *reformule le problème comme un problème d'évolution* [Bao & Du, 2004] :

$$\begin{cases} \partial_t \phi(\mathbf{x}, t) = -D_{\phi^*} \mathcal{E}(\phi(\mathbf{x}, t)) = -\mathcal{H} \phi(\mathbf{x}, t), \quad t \in [t_n, t_{n+1}[, \\ \phi^{n+1}(\mathbf{x}) := \phi(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \lim_{t \rightarrow t_{n+1}^-} \frac{\phi(\mathbf{x}, t)}{\|\phi(\cdot, t)\|_{L^2}}, \\ \phi^0(\mathbf{x}) = \phi_0(\mathbf{x}), \end{cases}$$

pour $t_0 = 0 < t_1 < \dots < t_n < \dots$

- A la limite $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x})$ est un point critique de \mathcal{E} et donc un état stationnaire.
- La discrétisation en temps et en espace de l'équation d'évolution doit assurer **la diminution de l'énergie** de la solution à chaque itération ainsi que **la robustesse** du schéma.

MÉTHODE CNGF POUR $\Omega = 0$

La méthode CNGF a été étudiée dans le cadre de l'équation de Gross-Pitaevskii sans rotation [Bao & *al.*, 2006].

- ▶ La discrétisation en temps de type **Euler semi-implicite** assure une diminution de l'énergie sans contrainte sur le pas de temps (CFL).
- ▶ La discrétisation en espace par une **approximation pseudo-spectrale** permet un gain en robustesse, en précision et en efficacité (FFT/iFFT parallélisables).

Le schéma est appelé **BESP** (Backward Euler SPectral).

SCHÉMA BESP POUR $\Omega \neq 0$

On obtient le système discrétisé par **approximation pseudo-spectrale**, pour $n \in \mathbb{N}$, $\delta t > 0$,

$$\begin{cases} \mathbb{A}^{BE,n} \tilde{\phi} = \mathbf{b}^{BE,n}, \\ \phi^{n+1} = \frac{\tilde{\phi}}{\|\tilde{\phi}\|_{\ell_2}}, \end{cases} \quad (1)$$

où \mathbb{A}^{BE} et \mathbf{b}^{BE} sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathbb{A}^{BE,n} &:= \left(\frac{\mathbb{I}}{\delta t} - \frac{1}{2} [[\Delta]] - \Omega [[L_z]] + \mathbb{V} + \beta |\phi^n|^2 \right), \\ \mathbf{b}^{BE,n} &:= \frac{\phi^n}{\delta t}. \end{aligned} \quad (2)$$

SCHÉMA BESP POUR $\Omega \neq 0$

La méthode BESP a été étendue dans le cadre d'une équation de Gross-Pitaevskii **avec rotation** [Zeng & Zhang, 2009]. Le système discrétisé est résolu, comme pour Bao lorsque $\Omega = 0$, *via un point fixe*.

- **Perte de robustesse** : lorsque la vitesse de rotation est trop grande, **le point fixe diverge**.

SOLUTION PROPOSÉE

La solution apportée pour contourner ce problème consiste à

- ▶ utiliser **des solveurs de Krylov** à la place du point fixe,
- ▶ accélérer la convergence de la méthode par l'introduction de **préconditionneurs analytiques**.

La méthode ainsi développée permet le calcul d'états stationnaires dans le cadre de **rotations rapides** mais aussi pour **des systèmes d'équations de Gross-Pitaevskii** [Antoine & D., *JCP*, 2014].

PRÉCONDITIONNEURS ANALYTIQUES

L'opérateur de BESP est donné par

$$\mathbb{A}^{BE,n} = \frac{\mathbb{I}}{\delta t} - \frac{1}{2}[[\Delta]] - \Omega[[L_z]] + \mathbb{V} + \beta|\phi^n|^2 \quad (3)$$

où

- ▶ $\frac{1}{2}[[\Delta]]$ est inversible dans l'espace de Fourier,
- ▶ $\mathbb{V} + \beta|\phi^n|^2$ est inversible dans l'espace physique,
- ▶ $\Omega[[L_z]]$ n'est inversible ni dans l'espace de Fourier ni dans l'espace physique.

PRÉCONDITIONNEUR DE LAPLACE

Un premier système préconditionné

$$\left(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{\Delta}^{BE} \mathbb{A}_{\Omega, TF}^{BE, n} \right) \tilde{\phi} = \mathbb{P}_{\Delta}^{BE} \mathbf{b}^{BE, n} \quad (4)$$

où

$$\mathbb{P}_{\Delta}^{BE} = \left(\frac{\mathbb{I}}{\delta t} - \frac{1}{2} [[\Delta]] \right)^{-1}, \quad \mathbb{A}_{\Omega, TF}^{BE, n} = -\Omega [[L_z]] + \mathbb{V} + \beta |\phi^n|^2.$$

On ne change pas le nombre d'opérations arithmétiques + facile à mettre en oeuvre *via* FFTs et iFFTs.

PRÉCONDITONNEUR DE THOMAS-FERMI

On considère cette fois les opérateurs diagonaux dans l'espace physique

$$\left(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{TF}^{BE,n} \mathbb{A}_{\Delta,\Omega}^{BE} \right) \tilde{\phi} = \mathbb{P}_{TF}^{BE,n} \mathbf{b}^{BE,n} \quad (5)$$

où

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{TF}^{BE,n} &= \left(\frac{\mathbb{I}}{\delta t} + \mathbb{V} + \beta |\phi^n|^2 \right)^{-1} \\ \mathbb{A}_{\Delta,\Omega}^{BE,n} &= -\frac{1}{2} [[\Delta]] - \Omega [[L_z]]. \end{aligned} \quad (6)$$

EXEMPLE DE CALCUL PAR BESP

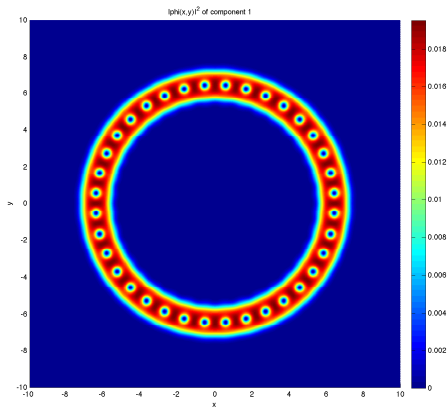


FIGURE: Exemple de calcul d'état stationnaire pour une rotation de $\Omega = \Omega_{\mathbf{e}_z}$, $\Omega = 3.5$ et un potentiel de type **quadratique-quartique** $V(\mathbf{x}) = (1 - \alpha)|\mathbf{x}|^2 + \kappa|\mathbf{x}|^4$, $\alpha = 1.2$ et $\kappa = 0.3$.

CONDENSATS DE BOSE-EINSTEIN ET L'ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII

CALCUL NUMÉRIQUE D'ÉTATS STATIONNAIRES

SIMULATION DYNAMIQUE

GPELAB

SCHÉMAS POUR LA SIMULATION DYNAMIQUE

Bonne méthode

- ▶ Schéma simple à implémenter, précis et peu coûteux en calcul.
- ▶ Conservation des quantités physiques comme la masse et l'énergie

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{1}{2} |\nabla \psi(\mathbf{x})|^2 + V(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x})|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi(\mathbf{x})|^4 \right) d\mathbf{x}.$$

On a choisit : **le schéma de splitting** et **le schéma de relaxation**.

PRINCIPE DU SPLITTING

On considère l'équation de Schrödinger suivante, $\forall T > 0$,

$$\begin{cases} i\partial_t \psi(t) = A\psi(t) + B\psi(t), \quad \forall t \in [0, T], \\ \psi(0) = \psi_0, \end{cases} \quad (7)$$

où A et B sont des opérateurs auto-adjoints sur un domaine \mathcal{D} .

- Le **splitting** consiste à construire **une approximation** de $\psi(t + \delta t) = e^{-i(A+B)\delta t} \psi(t)$ la solution de (7) par les solutions ψ_1 et ψ_2 suivantes

$$\begin{cases} i\partial_\tau \psi_1(\tau) = A\psi_1(\tau), \quad \forall \tau \in [t, t + \delta t], \\ \psi_1(t) = \psi_{1,0}, \end{cases} \Rightarrow \psi_1(t + \delta t) = e^{-iA\delta t} \psi_{1,0}.$$

$$\begin{cases} i\partial_\tau \psi_2(\tau) = B\psi_2(\tau), \quad \forall \tau \in [t, t + \delta t], \\ \psi_2(t) = \psi_{2,0}, \end{cases} \Rightarrow \psi_2(t + \delta t) = e^{-iB\delta t} \psi_{2,0}.$$

CONSTRUCTION D'UN SCHÉMA DE SPLITTING

Un schéma de splitting repose sur l'approximation de l'opérateur $e^{-i(A+B)\delta t}$ par les opérateurs $e^{-iA\delta t}$ et $e^{-iB\delta t}$

$$e^{-i(A+B)\delta t} \approx e^{-ia_1 A \delta t} e^{-ib_1 B \delta t} \dots e^{-ia_p A \delta t} e^{-ib_p B \delta t},$$

où $(a_j, b_j)_{j \in \{1, \dots, p\}}$ sont des points calculés de manière à obtenir un certain **ordre d'approximation**.

- ▶ Schéma de **Lie** : $L_{A,B}^{\delta t} = e^{-iA\delta t} e^{-iB\delta t}$, **ordre 1**,
- ▶ Schéma de **Strang** : $S_{A,B}^{\delta t} = e^{-iA\frac{\delta t}{2}} e^{-iB\delta t} e^{-iA\frac{\delta t}{2}}$, **ordre 2**,
- ▶ Schéma d'**ordre 4** : $Q_{A,B}^{\delta t} = e^{-ia_1 A \delta t} e^{-ib_1 B \delta t} \dots e^{-ia_4 A \delta t} e^{-ib_4 B \delta t}$,
avec

$$\begin{cases} a_1 = 0, & a_2 = a_4 = \frac{1}{2 - \sqrt[3]{2}}, & a_3 = \sqrt[3]{2} a_2, \\ b_1 = b_4 = \frac{1}{2} a_2, & b_2 = b_3 = \frac{1}{2} (a_2 + a_3). \end{cases}$$

APPLICATION DU SPLITTING AUX ÉQUATIONS DE GROSS-PITAEVSKII

Dans le cadre de l'équation de Gross-Pitaevski, on choisit la décomposition

$$\begin{cases} i\partial_\tau \psi_1(\tau, \mathbf{x}) = A\psi_1(\tau, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\Delta\psi_1(\tau, \mathbf{x}) - i\boldsymbol{\Omega} \cdot (\mathbf{x} \times \nabla)\psi_1(t, \mathbf{x}), \\ i\partial_\tau \psi_2(\tau, \mathbf{x}) = B\psi_2(\tau, \mathbf{x}) = V(\mathbf{x})\psi_2(\tau, \mathbf{x}) + \beta|\psi_2|^2\psi_2(\tau, \mathbf{x}). \end{cases}$$

La motivation derrière ce choix est la simplicité.

- ▶ On résout de façon directe la première équation *via* **FFT/iFFT** (lorsque $\boldsymbol{\Omega} = 0$),
- ▶ On **intègre exactement** de la seconde équation.

RÉSOLUTION DES ÉQUATIONS - SANS ROTATION

- Pour résoudre la **première équation**, on utilise

$$i\partial_\tau \hat{\psi}_1(\tau, \xi) = \frac{1}{2}|\xi|^2 \hat{\psi}_1(\tau, \xi) \Rightarrow \hat{\psi}_1(t + \delta t, \xi) = e^{-i\frac{1}{2}|\xi|^2 \delta t} \hat{\psi}_{1,0}(\xi),$$

où $\hat{\psi}_1 = \mathcal{F}(\psi_1)$ est la **transformée de Fourier** de ψ_1 . On obtient donc

$$\psi_1(t + \delta t, \mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1} \left(e^{-i\frac{1}{2}|\xi|^2 \delta t} \mathcal{F}(\psi_{1,0}) \right) (\mathbf{x}).$$

- Pour la **seconde équation**, on remarque que

$$|\psi_2(\tau, \mathbf{x})|^2 = |\psi_{2,0}(\mathbf{x})|^2,$$

ce qui nous permet d'obtenir l'**intégration exacte**

$$\psi_2(t + \delta t, \mathbf{x}) = e^{-i(V(\mathbf{x}) + \beta|\psi_{2,0}|^2)\delta t} \psi_{2,0}(\mathbf{x}).$$

CAS AVEC ROTATION - MÉTHODE ADI

- Lorsque $\Omega \neq 0$, on utilise une méthode **Alternate Direction Implicit** (ADI). On décompose

$$i\partial_\tau \psi_1(\tau, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\Delta \psi_1(\tau, \mathbf{x}) - i\Omega \cdot (\mathbf{x} \times \nabla) \psi_1(\tau, \mathbf{x}),$$

en

$$\left\{ \begin{array}{l} i\partial_\tau \psi_{(1)}(\tau, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\partial_x^2 \psi_{(1)}(\tau, \mathbf{x}) - i(\Omega_y z - \Omega_z y) \partial_x \psi_{(1)}(\tau, \mathbf{x}), \\ i\partial_\tau \psi_{(2)}(\tau, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\partial_y^2 \psi_{(2)}(\tau, \mathbf{x}) - i(\Omega_z x - \Omega_x z) \partial_y \psi_{(2)}(\tau, \mathbf{x}), \\ i\partial_\tau \psi_{(3)}(\tau, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\partial_z^2 \psi_{(3)}(\tau, \mathbf{x}) - i(\Omega_x y - \Omega_y x) \partial_z \psi_{(3)}(\tau, \mathbf{x}). \end{array} \right.$$

- Chaque équation est résolue par une **FFT/iFFT** directionnelle (x, y puis z).
- Cette décomposition permet de **conserver l'ordre** des schémas de Lie et Strang (**décomposition d'ordre 2**).

PRINCIPE DE LA RELAXATION

Le schéma de relaxation consiste à **relaxer le terme non linéaire** de l'équation de Schrödinger. L'équation de Schrödinger non linéaire

$$\begin{cases} i\partial_t\psi(t) = A\psi(t) + F(\psi(t))\psi(t), \\ \psi(0) = \psi_0, \end{cases}$$

où A est un opérateur linéaire et F la non linéarité, se discrétise de la façon suivante

$$\begin{cases} \tilde{F}^{n+1/2} = 2F(\psi^n) - \tilde{F}^{n-1/2}, \\ i\frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\delta t} = A\frac{\psi^{n+1} + \psi^n}{2} + \tilde{F}^{n+1/2}\frac{\psi^{n+1} + \psi^n}{2}, \end{cases}$$

avec les valeurs initiales

$$\psi^0 = \psi_0 \quad \text{et} \quad \tilde{F}^0 = F(\psi^0).$$

APPLICATION À L'ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII

Par une approximation pseudo-spectrale, on obtient le schéma ReSP

$$\begin{cases} \varphi^{n+1/2} = 2\beta|\psi^n|^2 - \varphi^{n-1/2}, \\ \mathbb{A}^{Re,n}\psi^{n+1} = \mathbf{b}^{Re,n}, \end{cases}$$

avec

$$\mathbb{A}^{Re,n} = i\frac{\mathbb{I}}{\delta t} - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}[[\Delta]] - \Omega[[L_z]] + \mathbb{V} + \varphi^{n+1/2} \right),$$

et

$$\mathbf{b}^{Re,n} = i\frac{\mathbb{I}}{\delta t} + \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2}[[\Delta]] - \Omega[[L_z]] + \mathbb{V} + \varphi^{n+1/2} \right) \psi^n.$$

PRÉCONDITIONNEURS ANALYTIQUES

L'opérateur de ReSP est donné par

$$\mathbb{A}^{Re,n} = i \frac{\mathbb{I}}{\delta t} - \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} [[\Delta]] - \Omega[[L_z]] + \mathbb{V} + \varphi^{n+1/2} \right)$$

où

- ▶ $\frac{1}{2} [[\Delta]]$ est inversible dans l'espace de Fourier,
- ▶ $\mathbb{V} + \varphi^{n+1/2}$ est inversible dans l'espace physique,
- ▶ $\Omega[[L_z]]$ n'est inversible ni dans l'espace de Fourier ni dans l'espace physique.

PRÉCONDITIONNEUR DE LAPLACE

Un premier système préconditionné

$$\left(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{\Delta}^{Re} \mathbb{A}_{\Omega, TF}^{Re, n} \right) \psi^{n+1} = \mathbb{P}_{\Delta}^{Re} \mathbf{b}^{Re, n}$$

où

$$\mathbb{P}_{\Delta}^{Re} = \left(i \frac{\mathbb{I}}{\delta t} + \frac{1}{4} [[\Delta]] \right)^{-1}, \quad \mathbb{A}_{\Omega, TF}^{Re, n} = \frac{1}{2} \Omega [[L_z]] - \frac{1}{2} \mathbb{V} - \frac{1}{2} \varphi^{n+1/2}.$$

PRÉCONDITONNEUR DE THOMAS-FERMI

Un second système préconditionné

$$\left(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{TF}^{Re,n} \mathbb{A}_{\Delta,\Omega}^{Re} \right) \psi^{n+1} = \mathbb{P}_{TF}^{Re,n} \mathbf{b}^{Re,n}$$

où

$$\mathbb{P}_{TF}^{Re,n} = \left(\frac{i\mathbb{I}}{\delta t} - \frac{1}{2}\mathbb{V} - \frac{1}{2}\varphi^{n+1/2} \right)^{-1}, \quad \mathbb{A}_{\Delta,\Omega}^{Re,n} = \frac{1}{4}[[\Delta]] - \frac{1}{2}\Omega[[L_z]].$$

CONDENSATS DE BOSE-EINSTEIN ET L'ÉQUATION DE GROSS-PITAEVSKII

CALCUL NUMÉRIQUE D'ÉTATS STATIONNAIRES

SIMULATION DYNAMIQUE

GPELAB

GPELAB

- ▶ La toolbox Matlab **GPELab** utilise essentiellement la méthode **BESP** pour le calcul d'états stationnaires d'équations de Schrödinger en $d = 1, 2, 3$. Elle est **librement distribuée** sur internet.
- ▶ GPELab intègre aussi un ensemble de méthodes spectrales pour la simulation dynamique (**schémas de splitting et relaxation**).
- ▶ Équations de Schrödinger traitées :
 - ▶ système couplé d'équations,
 - ▶ problème avec des interactions non locales,
 - ▶ potentiels en espace et en temps (stochastiques)...

UN EXEMPLE DE SCRIPT - VUE D'ENSEMBLE

Un script sous GPELab s'écrit de la manière suivante :

- ▶ Choix de la méthode et de la géométrie *via* les structures `Method` et `Geometry`,
- ▶ Définition du problème physique *via* la structure `Physics`,
- ▶ Choix des données en sortie *via* la structure `Outputs`,
- ▶ Lancement de la simulation grâce à la fonction `GPELab`.

D'autres structures existent afin de choisir, par exemple, les options d'affichages.

UN EXEMPLE DE SCRIPT - CHOIX DE LA MÉTHODE

La construction de la structure `Method` se fait grâce à la fonction `Method_Var2d` (en 2D).

```
Computation = 'Ground';  
Ncomponents = 1;  
Type = 'BESP';  
Deltat = 1e-1;  
Stop_time = [];  
Stop_crit = 1e-6;  
Method = Method_Var2d(Computation, Ncomponents,  
Type, Deltat, Stop_time , Stop_crit);
```

TABLE: Exemple de construction pour la structure `Method` dans GPEDLab.

UN EXEMPLE DE SCRIPT - CHOIX DE LA GÉOMÉTRIE

La construction de la structure `Geometry2D` se fait grâce à la fonction `Geometry2D_Var2d` (en 2D).

```
xmin = -10;  
xmax = 10;  
ymin = -10;  
ymax = 10;  
Nx = 2^8+1;  
Ny = 2^8+1;  
Geometry2D = Geometry2D_Var2d(xmin,xmax,  
ymin,ymax, Nx, Ny);
```

TABLE: Exemple de construction pour la structure `Geometry2D` dans GPEDAB.

UN EXEMPLE DE SCRIPT - DÉFINITION DU PROBLÈME PHYSIQUE

On veut calculer l'état stationnaire du système suivant.

$$\left\{ \begin{array}{l} i\partial_t \psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\Delta \psi(t, \mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}) \\ \quad + \Omega L_z \psi(t, \mathbf{x}) + \beta |\psi(t, \mathbf{x})|^2 \psi(t, \mathbf{x}), \quad t \in \mathbb{R}^+, \\ \psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2. \end{array} \right.$$

- ▶ $V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$ (potentiel quadratique),
- ▶ $\Omega L_z = i\Omega(y\partial_x - x\partial_y)$ avec $\Omega = 0.7$,
- ▶ $\beta = 300$.

UN EXEMPLE DE SCRIPT - DÉFINITION DU PROBLÈME PHYSIQUE

```
Delta = 0.5;
Beta = 300;
Omega = 0.7;
Physics2D = Physics2D_Var2d(Method,Delta,Beta);
Physics2D = Potential_Var2d(Method, Physics2D,
@(x,y) (1/2)*(x.^2+y.^2));
Physics2D = Nonlinearity_Var2d(Method,
Physics2D, @(phi,x,y) abs(phi).^2 );
Physics2D = Gradientx_Var2d(Method,
Physics2D,@(x,y) 1i*Omega*y);
Physics2D = Gradienty_Var2d(Method,
Physics2D,@(x,y) -1i*Omega*x);
```

TABLE: Définition du problème physique *via* la structure Physics2D.

UN EXEMPLE DE SCRIPT - CRÉATION DE LA DONNÉE INITIALE ET DES DONNÉES EN SORTIES, OPTIONS D’AFFICHAGES

```
InitialData_choice = 2 ;  
Phi_0 = InitialData_Var2d(Method, Geometry2D,  
Physics2D,InitialData_choice) ;  
Outputs = OutputsINI_Var2d(Method) ;  
Printing = 1 ;  
Evo = 15 ;  
Draw = 1 ;  
Print = Print_Var2d(Printing,Evo,Draw) ;  
[Phi,Outputs]= GPEDLab2d(Phi_0,Method,...  
Geometry2D,Physics2D,Outputs,[],Print) ;
```

TABLE: Donnée initiale, données en sortie, options d’affichage et lancement de la simulation.

UN EXEMPLE DE SCRIPT - ÉTAT STATIONNAIRE

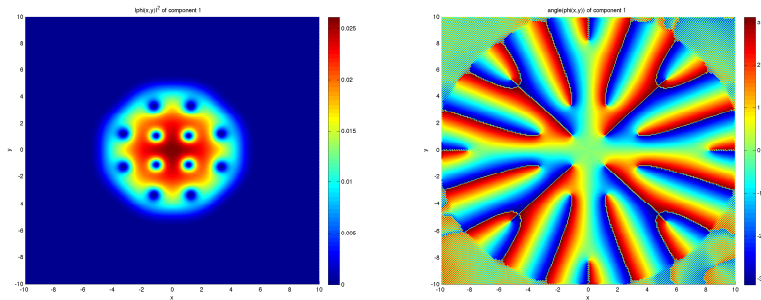


FIGURE: Module et phase de l'état stationnaire obtenu.

EXEMPLES DE CALCULS PAR BESP

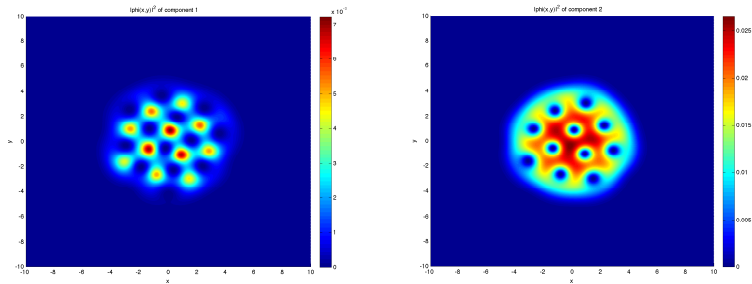


FIGURE: Exemple de calcul d'état stationnaire pour un système d'équations de Gross-Pitaevski avec rotation

EXEMPLES DE CALCULS PAR BESP

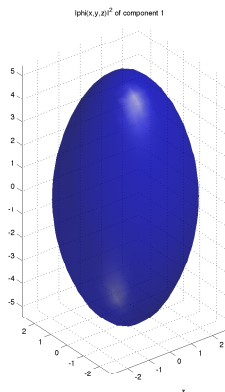


FIGURE: Exemple de calcul d'état stationnaire pour un condensat de Bose-Einstein avec interaction dipôle-dipôle

PERSPECTIVES (ANR BECASIM)

Par la suite, il serait plus particulièrement intéressant de continuer le développement de GPESLab sous un langage plus rapide (C++) afin de **paralléliser efficacement le code**, le développement d'un code sous GPU et enfin élargir les possibilités du code **en contact avec des physiciens expérimentateurs**.