

Projet : Mise en rotation d'un condensat de Bose-Einstein

proposé par Romain PONCET
romain.poncet@cmap.polytechnique.fr

Il est demandé aux étudiants de rendre un compte rendu au format **pdf**, compilé à l'aide de **L^AT_EX**, ainsi qu'un unique fichier **.sce** séparé, qui sera clair, entièrement commenté, et **exécutable sans aucune modification**. Toutes les figures devront figurer dans le pdf car l'exécution du code nécessitera une dizaine de minutes. Les étudiants pourront également construire une vidéo illustrant les résultats.

En guise de motivation, vous trouverez ici un exemple de simulation que ce projet permet de réaliser : <http://www.cmap.polytechnique.fr/~rponcet/BEC.mp4>.

Rappels sur les matrices sparses

Les schémas 1D qui seront codés dans ce projet sont des schémas peu coûteux en temps de calcul, à condition d'utiliser des matrices sparses et des solveurs d'algèbre linéaire adaptés aux matrices sparses. Je vous recommande de lire la documentation scilab sur les matrices sparses pour exploiter correctement cette spécificité de nos schémas.

- http://help.scilab.org/docs/5.3.0/fr_FR/sparse.html
- http://help.scilab.org/docs/5.3.0/fr_FR/lufact.html
- http://help.scilab.org/docs/5.5.0/en_US/conjgrad.html

On rappelle que les matrices sparses sont des matrices constituées principalement de zéros. Il est alors judicieux pour scilab de ne stocker en mémoire que les entrées non-nulles de la matrice.

Le cas 2D nécessite des simulations de l'ordre de 1 à 10 minutes (suivant votre machine), en exploitant le caractère sparse des matrices. Si vous avez recours à des matrices pleines, ou à des solveurs nécessitant l'utilisation de matrices pleines, alors non seulement c'est une faute, mais en plus les temps de calcul et la quantité de mémoire nécessaire deviennent prohibitifs...

Vous êtes donc obligés d'utiliser des matrices sparses et des solveurs adaptés aux matrices sparses (pour les matrices constituées principalement de zéros) dans ce projet !

Introduction

En reprenant les travaux du physicien Satyendranath Bose, Albert Einstein prédit vers les années 1925 qu'un gaz parfait de bosons devait subir une transition de phase si sa densité devenait suffisamment grande, caractérisée par le fait qu'une part significative de ces bosons devrait s'accumuler dans un même état fondamental : c'est ce que l'on appelle aujourd'hui un *condensat de Bose-Einstein*. Autrement dit, la distribution statistique de Boltzmann est remplacée par une nouvelle distribution. Pour que ce phénomène quantique soit observable à l'échelle macroscopique, il est nécessaire que les effets de statistique quantique commencent à se manifester, ce qui arrive quand les distances inter-bosons deviennent du même ordre de grandeur que leurs longueurs d'onde de De Broglie.

Pour mettre en évidence les contraintes imposées par la mécanique quantique, on peut essayer de mettre en rotation le condensat en le confinant dans un potentiel ellipsoïdale tournant. Cependant, le condensat ne peut tourner en bloc comme le ferait un objet classique. Il se crée alors, pour une vitesse de rotation suffisamment grande, des vortex dans le condensat. Ceux-ci sont caractérisés par des points de densité nulle (i.e. des points en lesquels la fonction d'onde du condensat s'annule), et autour desquelles le fluide est en rotation (cette notion de rotation serait à préciser...). Nous les mettrons simplement en évidence en observant des "trous" de densité.

Des expériences ont été réalisées pour mettre en évidence ce phénomène, notamment par l'équipe de Jean Dalibard au laboratoire Kastler Brossel de l'ENS. Les figures 1 et 2 montrent le résultat d'une telle expérience. Le condensat est représenté en blanc, et on peut observer la formation d'un "trou"

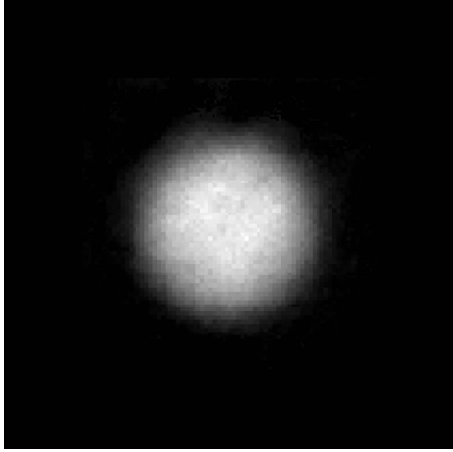


FIGURE 1 – Etat initial

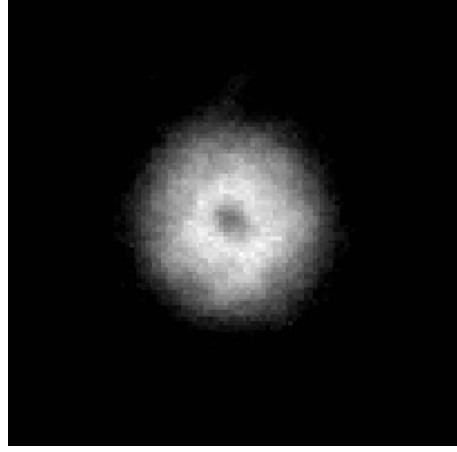


FIGURE 2 – Apparition d'un vortex central

au centre du condensat dans la figure 2. On peut faire apparaître plus de vortex en changeant les conditions expérimentales.

L'objectif du projet est de reproduire numériquement ce type d'expérience.

1 Modélisation

On modélise l'expérience par une succession de phases d'évolution de la fonction d'onde ψ , donnée par l'équation de Gross-Pitaevskii 2D avec rotation suivante,

$$i \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial t} = (-\Delta + (1 + \varepsilon_x)x^2 + (1 + \varepsilon_y)y^2 + g|\psi(x, y, t)|^2 - \mu - \Omega L_z) \psi(x, y, t), \quad x, y \in \mathbb{R}, \quad t \geq 0, \quad (1)$$

et de phases de minimisation de l'énergie du système par une méthode de descente de gradient à pas fixe sous contrainte de conservation de la norme L^2 de ψ .

Dans l'équation de Gross-Pitaevskii, le terme $((1 + \varepsilon_x)x^2 + (1 + \varepsilon_y)y^2)\psi(x, y, t)$ correspond au potentiel de confinement. Pour pouvoir mettre le condensat en rotation, on introduira une anisotropie en choisissant $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y$. Cette rotation est imposée par le terme $-\Omega L_z \psi(x, y, t)$ correspond au terme de rotation, avec $L_z = -i(x\partial_y - y\partial_x)$. Le terme non-linéaire cubique $g|\psi(x, y, t)|^2\psi(x, y, t)$ modélise les interactions entre bosons, avec $g \geq 0$.

2 Quelques questions théoriques

Question 1 Montrer que l'équation de Gross-Pitaevskii (1) conserve la densité $N(\psi)$, définie comme le carré de la norme L^2 de la fonction d'onde :

$$N(\psi) = \int_{\mathbb{R}^2} |\psi(t, x, y)|^2 dx dy,$$

est constante en temps.

Question 2 Montrer que l'équation de Gross-Pitaevskii (1) conserve l'énergie $E(\psi)$, définie par

$$E(\psi) = \int_{\mathbb{R}^2} \left(|\nabla \psi|^2 + (V(x) - \mu) |\psi|^2 + \frac{g}{2} |\psi|^4 - \Omega \psi^* L_z \psi \right) dx dy,$$

où ψ^* est le complexe conjugué de ψ , est constante en temps.

Remarque 1 On pourra se servir de ces questions pour vérifier son code

3 Transformée de Hermite, et quadrature de Gauss-Hermite

Avant de proposer un schéma numérique pour l'équation (1), on commencera par construire une transformée de Hermite naïve (en terme de complexité/temps de calcul) en dimension 2, basée sur une quadrature de Gauss-Hermite.

Commençons par quelques rappels sur les polynômes de Hermite et sur les fonctions de Hermite. Ces polynômes forment une base orthogonale de polynômes unitaires pour le produit scalaire $(u, v) \mapsto \int_{\mathbb{R}} u(x)v(x)e^{-x^2} dx$. Elle est obtenue par le procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt. On note $(H_n)_{n \in \mathbb{N}}$ cette famille. Elle vérifie les propriétés suivantes,

Proposition 1 Pour tout $m, n \in \mathbb{N}$ et pour tout $x \in \mathbb{R}$,

1. $\int_{\mathbb{R}} H_m(x)H_n(x)e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}2^n n! \delta_{m,n}$.
2. $xH_n(x) = \frac{1}{2}H_{n+1}(x) + nH_{n-1}(x)$.
3. $H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$.

On définit maintenant les fonctions d'Hermite pour tout $n \in \mathbb{N}$ par $\psi_n(x) = (\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2} e^{-x^2/2} H_n(x)$. Cette famille forme une base orthonormée de $L^2(\mathbb{C})$.

Si ces fonctions sont particulièrement intéressantes pour nous, c'est parce qu'elles sont les vecteurs propres de l'opérateur $-\Delta + |x|^2$ qui apparaît dans (1). Plus précisément, pour tout $n \in \mathbb{N}$

$$(-\Delta + |x|^2)\psi_n(x) = (2n + 1)\psi_n(x).$$

On cherche maintenant à construire une transformée de Hermite (d'abord en dimension 1). C'est-à-dire que pour $f \in L^2(\mathbb{C})$, on veut calculer les composantes de f dans la base de Hermite $(\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$. Grâce à l'orthonormalité de cette famille, pour $n \in \mathbb{N}$, la composante de f sur ψ_n est notée \hat{f}_n et est donnée par

$$\hat{f}_n = \int_{\mathbb{R}} f(x)\psi_n(x)dx. \quad (2)$$

\hat{f}_n n'est autre que la projection orthogonale de f sur l'espace vectoriel engendré par ψ_n . Pour calculer numériquement l'intégrale (2), on utilise une méthode numérique appelée quadrature de Gauss-Hermite. L'idée est d'approcher le calcul de cette *somme continue* par un calcul de *somme discrète*. C'est la même idée que la construction de l'intégrale de Riemann. Cette méthode est particulièrement intéressante car elle est exacte dans certains cas comme l'énonce le théorème suivant,

Théorème 1 Pour tout $K \in \mathbb{N}$, il existe $(\omega_i) \in \mathbb{R}^K$ et $(x_i) \in \mathbb{R}^K$ tels que pour tout polynôme P de degrés inférieur à $2K - 1$,

$$\int_{\mathbb{R}} P(x)e^{-x^2} dx = \sum_{i=1}^K \omega_i P(x_i)$$

Les noeuds x_i sont les zéros de H_K , et les poids ω_i sont définis par

$$\omega_i = \frac{2^{K-1} K! \sqrt{\pi}}{K^2 H_{K-1}(x_i)^2}$$

On notera bien que la valeur des noeuds et des poids dépend du choix de la taille K de la quadrature!

Le calcul des zéros de H_K se fait habituellement à l'aide de la matrice companion. Il n'est pas demandé de faire ce calcul. Vous pourrez trouver les valeurs des noeuds et des poids de cette quadrature à cette adresse : <http://keisan.casio.com/exec/system/1281195844>, les sauver dans un fichier, puis les charger dans scilab à l'aide la fonction `fscanfMat`.

Question 3 Pour $K = 20$, $K = 30$ ou $K = 40$, construire une matrice $T \in M_K(\mathbb{R})$ et une matrice $T_i \in M_K(\mathbb{R})$, telle que, pour toute fonction à valeurs complexes $f \in C_0(\mathbb{R})$, $\hat{F} = TF$ et $F = Ti\hat{F}$, où F et \hat{F} sont les vecteurs colonnes de \mathbb{C}^K , définis pour $0 \leq i \leq K - 1$ par $F_i = f(x_i)$, et $\hat{F}_i = \hat{f}_i$, où les x_i sont les noeuds de la quadrature de Gauss-Hermite de taille K .

Ces matrices T et T_i sont des matrices pleines. Il n'est donc pas nécessaire de les stocker comme des matrices creuses. Par ailleurs, il est possible qu'il soit préférable de construire ces deux matrices plutôt que d'inverser l'une des deux pour obtenir la deuxième. En effet, cela peut-être dû à des approximations numériques. C'est la raison pour laquelle, on vérifiera bien que $T \cdot T_i = T_i \cdot T = Id$.

On se place maintenant en dimension 2. On notera \mathbf{x} un élément de \mathbb{R}^2 et $\mathbf{x} = (x, y)$. La famille $(\psi_m(x)\psi_n(y))_{m,n \in \mathbb{N}}$ forme une base orthonormale des fonctions L^2 de \mathbb{R}^2 à valeurs dans \mathbb{C} . On note dans la suite $\hat{f}_{m,n} = \int_{\mathbb{R}^2} f(\mathbf{x})\psi_m(x)\psi_n(y)dxdy$. C'est la composante de f sur $\psi_m(x)\psi_n(y)$ dans cette base.

Question 4 On prendra pour cette question $K = 20$, $K = 30$ ou $K = 40$. pour $0 \leq i \leq (K - 1)^2$, on notera $m(i)$ (resp. $n(i)$) le quotient (resp. le reste) de la division euclidienne de i par K . Ainsi : $i = m(i)K + n(i)$. Construire une matrice $T \in M_{K^2}(\mathbb{R})$ et une matrice $T_i \in M_{K^2}(\mathbb{R})$, telle que, pour toute fonction f continue à valeurs complexes, $\hat{F} = TF$ et $F = Ti\hat{F}$, où F et \hat{F} sont les vecteurs colonnes de \mathbb{C}^{K^2} , définis pour $0 \leq i \leq (K - 1)^2$ par $F_i = f((x_{m(i)}, x_{n(i)}))$, et $\hat{F}_i = \hat{f}_{m(i),n(i)}$.

On pourra utiliser la fonction `kron` pour répondre à cette question, et on vérifiera encore que $T \cdot T_i = T_i \cdot T = Id$.

4 Résolution numérique

Pour résoudre ce type d'équations, il est nécessaire de discrétiser le temps ainsi que l'espace. En cours, vous avez étudié des discrétisations en temps telles que les schémas explicites, implicites, ainsi que les schémas de Crank-Nicolson. Vous avez également étudié les discrétisations en espace de type différences finies. Dans la suite, nous introduirons une nouvelle discrétisation en espace dite spectrale. Il est important de comprendre que l'on peut très bien utiliser une discrétisation en temps de type Crank-Nicolson, avec une discrétisation spectrale en espace : le terme Crank-Nicolson ne qualifie que la discrétisation en temps!

Nous commencerons par traiter le cas unidimensionnel, plus simple. Dans ce cas, le terme de rotation n'a pas de sens. Ainsi, l'équation peut s'écrire plus simplement,

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = (-\Delta + x^2 + g|\psi(x, t)|^2 - \mu) \psi(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \geq 0. \quad (3)$$

. Nous utiliserons une technique de splitting pour traiter la non-linéarité (expliquée dans la suite). Nous passerons ensuite au cas bidimensionnel.

Dans toute la suite, on notera T l'horizon temporel de résolution, N_t le nombre de points de discrétisation en temps, et $\delta t = T/N_t$ le pas de temps. On notera également $t_n = n\delta t$ et $t_{n+1/2} = (n + 1/2)\delta t$.

4.1 Cas 1D - Splitting

On propose un schéma de splitting, dont voici la définition. Il ne s'agit pour l'instant qu'une approximation en temps, et nous expliquerons ensuite comment approximer en espace ce schéma. Pour $\psi(t_n)$ donné, on approxime $\psi(t_{n+1})$ de la manière suivante. On note ψ_1 la solution de l'équation

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi_1(x, t)}{\partial t} = (-\Delta + x^2 - \mu) \psi_1(x, t), & x \in \mathbb{R}, \quad t \geq t_n, \\ \psi_1(t_n) = \psi(t_n). \end{cases} \quad (4)$$

On note ψ_2 la solution de l'équation

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi_2(x, t)}{\partial t} = g |\psi_2(x, t)|^2 \psi_2(x, t), & x \in \mathbb{R}, \quad t \geq t_n, \\ \psi_2(t_n) = \psi_1(t_{n+1/2}). \end{cases} \quad (5)$$

On note ψ_3 la solution de l'équation

$$\begin{cases} i \frac{\partial \psi_3(x, t)}{\partial t} = (-\Delta + x^2 - \mu) \psi_3(x, t), & x \in \mathbb{R}, \quad t \geq t_n, \\ \psi_3(t_{n+1/2}) = \psi_2(t_{n+1}). \end{cases} \quad (6)$$

Et on approxime $\psi(t_{n+1})$ par $\psi_3(t_{n+1})$.

L'équation (5) se résout exactement en remarquant que

$$\frac{d}{dt} |\psi_2(t, x)|^2 = 0, \quad (7)$$

ce qui implique,

$$\psi_2(t_{n+1}) = \exp\left(-i\delta t g |\psi_2(t_n)|^2\right) \psi_2(t_n).$$

Supposons que $\psi_2(t_n) \in Vect(e_0, \dots, e_{K-1})$, et que l'on ne connaisse que ses composantes dans la base de Hermite. Dans ce cas le calcul de (7) serait très difficile. Par contre, à l'aide d'une transformation de Hermite, on se ramène à la connaissance de $\psi_2(t_n)$ sur les noeuds de la quadrature de Gauss-Hermite, et alors le calcul de $\psi_2(t_{n+1})$ est immédiat en chaque noeud. On peut alors retrouver (une approximation de) $\psi_2(t_{n+1})$ dans la base de Hermite, par la transformée inverse.

Par ailleurs, grâce au fait que les fonction de Hermite sont les vecteurs propres de l'opérateur $-\Delta + |x|^2$, les équations (4) et (6) peuvent également se résoudre exactement et immédiatement à l'aide d'une discrétisation spectrale. Ainsi, la résolution sera exacte sur chaque mode de Hermite (à vous de faire le calcul).

L'idée est donc de représenter en mémoire la solution ψ_1 par un vecteur contenant les K premières composantes de ψ_1 dans la base de Hermite. On peut alors calculer exactement les K premières composantes de $\psi_2(t_n)$ dans la base de Hermite, puis utiliser notre transformée de Hermite inverse pour calculer les valeurs de $\psi_2(t_n)$ en les K noeuds de la quadrature. On calculera ensuite la valeur exacte de $\psi_2(t_{n+1})$ en les K noeuds de la quadrature. On utilise alors notre transformée de Hermite pour obtenir les valeurs des K premières composantes dans la base de Hermite de $\psi_3(t_{n+1/2})$. On pourra alors calculer $\psi_3(t_{n+1})$. Puis on itère ce procédé à chaque pas de temps.

On choisira pour condition initiale : $\psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$, la première fonction de Hermite.

Question 5 Implémenter ce schéma. Vérifier la conservation de la norme L^2 . L'énergie n'est pas exactement conservée, mais mettez en évidence qu'elle est presque conservée :

$$E(\psi) = \int_{\mathbb{R}} \left(|\nabla \psi|^2 + (V(x) - \mu) |\psi|^2 + \frac{g}{2} |\psi|^4 \right) dx,$$

4.2 Cas 1D (Discrétisation par différences finies)

Cette partie est facultative et peut vous apporter des points bonus, notamment si vous ne parvenez pas à traiter le cas 2D. Néanmoins, elle devra être lue car elle contient des explications sur l'implémentation des schémas de Crank-Nicolson, qui devront être mises en pratiques dans la partie suivante. Je vous conseille de la traiter si vous ne parvenez pas à finir la partie suivante (cas 2D).

Dans cette partie, on comparera le schéma précédent avec le schéma de Crank-Nicolson, basé sur une discrétisation spatiale par différences finies. La semi-discrétisation en temps est donnée par :

$$\left(Id + \frac{i}{2} \delta t (-\Delta + |x|^2 - \mu + R^{n+1/2}) \right) \psi^{n+1} = \left(Id - \frac{i}{2} \delta t (-\Delta + |x|^2 - \mu + R^{n+1/2}) \right) \psi^n,$$

où $R^{n+1/2}$ est défini par $R^{n+1/2} + R^{n-1/2} = 2|\psi^n|^2$ et $R^{-1/2} = |\psi^0|^2$, et où pour tout $n \in \mathbb{N}$, ψ^n est une approximation de $\psi(t_n)$. L'opérateur Δ doit alors être discrétisé pour une discrétisation par différences finies (comme vu en cours). Il n'y a pas besoin d'utiliser les fonctions de Hermite dans cette partie.

Ce schéma (implicite) s'écrit (et se résout) sous la forme d'un système linéaire $M_n \Psi^{n+1} = \bar{M}_n \Psi^n$. Remarquons d'abord que la matrice M_n est creuse, et qu'elle doit donc être implémentée de la sorte ! Ensuite, pour résoudre ce système, il faut utiliser un solveur (sparse) (qui exploite par exemple une décomposition LU), et ne surtout pas calculer l'inverse de M_n , qui elle est une matrice pleine ! Par ailleurs, on peut également gagner en efficacité en évitant de calculer le produit matrice-vecteur $\bar{M}_n \Psi^n$. Pour cela, on ré-écrit ce système sous la forme :

$$M_n \left(\frac{\Psi^{n+1} + \Psi^n}{2} \right) = \Psi^n.$$

Cette astuce devrait toujours être implémentée pour les schémas de Crank-Nicolson.

Question 6 Implémenter ce schéma. Vous devez inclure dans votre rapport quelques simulations en précisant les paramètres numériques. Comparer ce schéma avec le précédent du point de vue de leurs précisions numériques (à degrés de liberté fixés).

4.3 Cas 2D (Discrétisation spectrale et différences finies)

Le schéma employé dans cette partie combinera une évolution du système par l'équation de Gross-Pitaevskii, à une minimisation de l'énergie (sous contrainte de conservation de la densité) par une méthode de descente de gradient à pas fixe avec projection.

La discrétisation spectrale s'obtient en projetant l'équation sur l'espace généré par la famille

$$\{e_i(x)e_j(y), 0 \leq i, j \leq K-1\}.$$

On a alors :

$$(-\Delta + x^2 + y^2)e_i(x)e_j(y) = 2(i+j+1)e_i(x)e_j(y).$$

Le calcul de $(\varepsilon_x x^2 + \varepsilon_y y^2 - \Omega L_z)e_i(x)e_j(y)$ vous est laissé.

On utilisera à nouveau une technique de splitting en séparant le terme non-linéaire de la partie linéaire : pour $\psi(t_n)$ donné, on approxime $\psi(t_{n+1})$ de la manière suivante. On note ψ_1 la solution de l'équation

$$\begin{cases} (i - \gamma) \frac{\partial \psi_1(x, y, t)}{\partial t} = (-\Delta + (1 + \varepsilon_x)x^2 + (1 + \varepsilon_y)y^2 - \mu - \Omega L_z) \psi_1(x, y, t), & x, y \in \mathbb{R}, \quad t \geq t_n, \\ \psi_1(t_n) = \psi(t_n). \end{cases} \quad (8)$$

On note ψ_2 la solution de l'équation

$$\begin{cases} (i - \gamma) \frac{\partial \psi_2(x, y, t)}{\partial t} = g|\psi_2(x, y, t)|^2 \psi_2(x, y, t), & x, y \in \mathbb{R}, \quad t \geq t_n, \\ \psi_2(t_n) = \psi_1(t_{n+1/2}). \end{cases} \quad (9)$$

On note ψ_3 la solution de l'équation

$$\begin{cases} (i - \gamma) \frac{\partial \psi_3(x, y, t)}{\partial t} = (-\Delta + (1 + \varepsilon_x)x^2 + (1 + \varepsilon_y)y^2 - \mu - \Omega L_z) \psi_3(x, y, t), & x, y \in \mathbb{R}, \quad t \geq t_n, \\ \psi_3(t_{n+1/2}) = \psi_2(t_{n+1}). \end{cases} \quad (10)$$

Puis on pose $\psi_4(t_{n+1}) = \frac{\psi_3(t_{n+1})}{|\psi_3(t_{n+1})|_{L^2}}$. Et on approxime $\psi(t_{n+1})$ par $\psi_4(t_{n+1})$. Nous rappelons que le calcul de $|\psi_3(t_{n+1})|_{L^2}$ est donné simplement par la somme des carrés des composantes de $\psi_3(t_{n+1})$ dans la base de Hermite, car c'est une base orthonormée pour le produit scalaire dans L^2 .

L'équation (10) ne se résout plus exactement, mais on supposera que $|\psi_2(x, t)|^2$ est constant, ce qui implique,

$$\psi_2(t_{n+1}) \simeq \exp\left(\frac{1}{i - \gamma} \delta t g |\psi_2(t_n)|\right) \psi_2(t_n).$$

On fera cette approximation pour résoudre cette équation.

La méthode à employer est la même que dans la partie précédente : il faut résoudre les équations (8) et (10) à l'aide d'une discrétisation spectrale, tandis que la résolution de (9) se résout après une transformation de Hermite. La différence par rapport au cas 1D est que dans le cas $(\varepsilon_x, \varepsilon_y) \neq (0, 0)$, les équations (8) et (10) ne peuvent plus se résoudre exactement car les modes de Hermite (i.e. les fonctions propres de l'opérateur $-\Delta + (1 + \varepsilon_x)x^2 + (1 + \varepsilon_y)y^2$) sont couplés (voir le calcul de $(\varepsilon_x x^2 + \varepsilon_y y^2 - \Omega L_z)e_i(x)e_j(y)$). On les résoudra par une méthode de Crank-Nicolson (avec une discrétisation spectrale bien sûr) à l'aide de matrices creuses ! Il ne faut pas utiliser une discrétisation par différences finies, et discrétiser le Laplacien et le terme de rotation L_z !

Question 7 Justifier en quoi l'ajout du terme γ et l'étape de normalisation s'identifient à une méthode d'optimisation sous contraintes vue en cours.

Question 8 Justifier, du point de vue de la stabilité, l'utilisation d'un schéma de Crank-Nicolson pour résoudre les équations linéaires (8) et (10).

Question 9 Implémenter ce schéma numérique. Pour la résolution des systèmes linéaires qui apparaissent en résolvant (8) et (10), on utilisera une méthode de gradient conjugué. Cette méthode étant itérative, il est nécessaire de commencer avec une bonne approximation de la solution. Quel état initial pensez-vous prendre ? Pourquoi ? Comparer cette méthode de résolution de système linéaire avec un solveur LU où l'on aura factorisé dans le code la décomposition LU.

Pour obtenir de bons résultats, je vous conseille ces ordres de grandeur pour les paramètres numériques :

- $T \geq 150$
- $dt \sim 0.01$
- $K \sim 30$
- $\mu = 10$;
- $\omega \in [1.60, 1.95]$
- $\gamma \sim 0.07$

Le temps de calcul devrait être compris entre 1 et 10 minutes (suivant votre machine et les paramètres numériques). Tracer l'évolution du module de la fonction d'onde, ainsi que celle de sa phase. Que remarquez-vous sur la phase au centre des vortex. Etudier grossièrement l'impact de ω sur le nombre de vortex.

Je vous conseille de construire un film de votre simulation. Pour cela, il faut extraire des images de votre simulation numérique (~ 200), puis les assembler, par exemple à l'aide de `ffmpeg` sous linux et mac. Vous pouvez joindre ce film à votre compte-rendu.