

## Méthodes spectrales pour la simulation de condensats de Bose-Einstein Vers la simulation haute-performance de la turbulence quantique

### Responsables :

**Ionut DANAILA**

ionut.danaila@univ-rouen.fr

**Francky Luddens**

francky.luddens@univ-rouen.fr

**Corentin Lothodé**

corentin.lothode@univ-rouen.fr

**Laboratoire de mathématiques Raphaël Salem, Université de Rouen Normandie**

### Contexte et perspectives :

Le stage se déroulera dans le cadre du projet ANR QUTE-HPC (2019-2022), porté par I. Danaila. Ce projet est dédié à la modélisation et la simulation haute-performance de systèmes superfluides, comme le condensat de Bose-Einstein ou l'hélium superfluide. Il réunit 10 chercheurs permanents de Rouen, Paris, Lyon, Poitiers et Grenoble, avec des compétences en mathématiques appliquées, physique et calcul haute-performance. Le stagiaire bénéficiera ainsi d'un environnement scientifique stimulant et de la possibilité de participer aux nombreuses collaborations internationales établies dans le cadre du projet QUTE-HPC.

Le stage pourrait se poursuivre par une thèse débutant le 1er octobre 2019 (financement ANR).

### Positionnement du sujet :

La recherche dans le domaine des condensats de Bose-Einstein a une dynamique très rapide, accélérée depuis le prix Nobel de 2001. La simulation numérique dans ce domaine est de plus en plus utilisée pour l'analyse des phénomènes physiques difficilement observables expérimentalement. En particulier, l'étude numérique de la turbulence quantique est un sujet de grande actualité qui nécessite des méthodes numériques avancées et des simulations haute-résolution sur des ordinateurs parallèles.

Plusieurs méthodes numériques ont été développées et implémentées dans des codes de calcul au LMRS, en utilisant le logiciel FreeFem++ [1]. Ces nouvelles méthodes ont été testées et validées en utilisant une discrétisation spatiale basée sur des éléments finis et un maillage adaptatif [2, 3]. Nous envisageons d'étudier ces méthodes avec une discrétisation spatiale de type Fourier-spectral, en utilisant toujours FreeFem++. Les méthodes ainsi validées seront ensuite implémentées dans le code parallèle GPS (MPI-OpenMP) [4], qui est disponible dans le projet QUTE-HPC et qui servira à simuler des configurations de type turbulence quantique.

### Description du sujet :

Le sujet se situe à l'interface entre mathématiques appliquées et modélisation physique, sans toutefois nécessiter des connaissances approfondies en physique quantique. Le travail va combiner le développement de méthodes numériques adaptées au problème et la programmation en utilisant le logiciel FreeFem++. L'utilisation du code GPS (écrit en Fortran, et utilisant les paradigmes MPI-OpenMP) sera nécessaire pour la validation des programmes développés sous FreeFem++.

La base de départ des travaux sera constituée par les programmes développés sous FreeFem++ pour la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii (équation de type Schrödinger non-linéaire). Ces programmes seront modifiés pour passer de la discrétisation spatiale de type éléments finis vers une discrétisation de type Fourier-spectral. L'interface avec FFTW, une bibliothèque moderne pour la transformée de Fourier rapide (FFT), est disponible sous FreeFem++ et sera utilisée pour implémenter la nouvelle méthode spectrale. Une attention particulière sera accordée à la validation théorique et numérique de la nouvelle méthode spectrale. D'autres algorithmes seront ensuite développés et testés avec ce système numérique. Les méthodes les plus performantes seront ensuite portées dans le code GPS, en utilisant les ordinateurs du centre de calcul CRIANN.

### Bibliographie :

- [1] <http://www.freefem.org>
- [2] G. Vergez, I. Danaila, S. Auliac and F. Hecht: *A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation*, **Computer Physics Communications**, 209, p. 144–162, 2016.
- [3] I. Danaila, F. Hecht: *A finite element method with mesh adaptivity for computing vortex states in fast-rotating Bose-Einstein condensates*, **Journal of Computational Physics**, 229, p. 6946–6960, 2010.
- [4] P. Parnaudeau, J.-M. Sac-Epée, A. Suzuki, *GPS: an efficient and spectrally accurate code for computing Gross-Pitaevskii Equation*, International Super Computing (ISC) Frankfurt (Germany), July 12-16, 2015.