



Normandie Université

THÈSE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Spécialité MATHÉMATIQUES

Préparée au sein de l'Université de Rouen Normandie

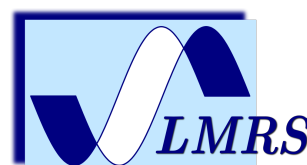
**Turbulence quantique dans 4He et condensats de Bose-Einstein:
modélisation et simulation numérique haute performance**

**Présentée et soutenue par
VICTOR KALT**

**Thèse soutenue le 19/01/2023
devant le jury composé de**

M. LAURENT DI MENZA	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, UNIVERSITÉ REIMS CHAMPAGNE ARDENNE	Rapporteur du jury
M. CHRISTOPHE JOSSEMAND	DIRECTEUR DE RECHERCHE, Ecole Polytechnique de Palaiseau	Rapporteur du jury
MME MARCELA SZOPOS	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, UNIVERSITÉ PARIS CITE	Membre du jury
M. FRÉDÉRIC HECHT	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, SORBONNE UNIVERSITÉ	Président du jury
M. IONUT DANAILA	PROFESSEUR DES UNIVERSITÉS, Université de Rouen Normandie	Directeur de thèse
M. MARC BRACHET	DIRECTEUR DE RECHERCHE, ECOLE NORMALE SUPÉRIEURE PARIS	Co-directeur de thèse

**Thèse dirigée par IONUT DANAILA (LABORATOIRE DE MATHÉMATIQUE RAPHAEL
SALEM) et MARC BRACHET (Laboratoire de Physique de l'Ecole Normale
Supérieure)**



Remerciements

Je souhaite remercier en premier lieu Ionut Danaila et Marc Brachet pour l'accompagnement et le soutien qu'ils m'ont apporté tout au long de la thèse. Le travail présenté ici n'aurait pas été possible sans leurs conseils et encouragements. Ils m'ont offert la possibilité de participer à diverses conférences et écoles nationales et internationales qui ont été une expérience très enrichissante.

Je remercie Laurent Di Menza et Christophe Josserand pour avoir accepté d'être mes rapporteurs ainsi que les autres membres du jury, Frédéric Hecht et Marcella Szopos.

Je remercie l'ANR QUTE-HPC pour avoir financé ma thèse et l'ensemble de ses membres avec qui j'ai pu interagir: Luminita Danaila, Ioana Ciotir, Philippe Parnaudeau, Emmanuel Lévêque, Juan Polanco, Philippe Roche, Benoît Chabaud, Eric Woillez. Merci à Weizhu Bao pour son invitation à Singapour: pouvoir débiter la thèse en assistant à une conférence présentant des approches variées sur le thème des fluides quantiques a été une grande chance. Merci à Stathis Charalampidis pour les conseils qu'il m'a donné lors de son passage à Rouen. J'espère que nous continuerons à collaborer ensemble car un grand nombre d'idées ont été proposées et beaucoup de questions restent ouvertes.

Je remercie l'université de Rouen Normandie, et en particulier le Laboratoire de Mathématiques Raphaël Salem et l'ensemble de ses membres.

Je remercie évidemment tous les membres de l'équipe calcul scientifiques. Francky Luddens pour ses conseils avisés, Corentin Lothodé pour sa patience devant les problèmes logiciels que je lui présentais. Merci aux doctorants et post-doctorants de l'équipe, Cécile Legrand, Cyril Tain et Zhentong Zhang pour les discussions et réflexions intéressantes que nous avons pu partager ainsi que pour leurs conseils sur l'utilisation de nombreux outils numériques. Un grand merci à Georges Sadaka avec qui j'ai pu collaborer sur de nombreux projets. Il a su me guider dans la découverte et l'apprentissage de Freefem et me motiver à mieux comprendre les logiciels que j'utilisais. Son organisation et ses méthodes de travail ont été un exemple inspirant.

Un grand merci à tous les doctorants du LMRS pour leur présence et leur soutien. La bonne ambiance au sein du groupe des doctorants a rendu ces trois années agréables. Merci à Mirella et Séverin de m'avoir motivé à faire du badminton, afin de rester en forme mais aussi de me changer les idées.

Je remercie toute ma famille et mes proches pour leur soutien tout au long de ces trois années. Mes parents qui m'ont accueilli pendant les périodes de confinement du Covid afin que je puisse me concentrer sur mon travail. Mes soeurs et grands-parents qui m'ont toujours soutenu, même sans forcément comprendre ce que je faisais de mes journées. Merci à mes amis et plus particulièrement Florian Lamaze, Thomas Simon et Jean Bichet pour leur soutien.

Enfin, merci à tous ceux que j'ai pu oublier.

Table des matières

1. Introduction	1
1.1. Hélium, superfluides et condensats de Bose-Einstein	1
1.2. Objectifs et problématiques de la thèse	4
1.2.1. Problématiques étudiées	4
1.2.2. Objectifs de la thèse	6
1.3. Organisation du mémoire	7
2. Modélisation des superfluides par l'équation de Gross-Pitaevskii	9
2.1. Équation de Gross-Pitaevskii pour un gaz de Bose dilué	9
2.2. Énergie et équation de Gross-Pitaevskii avec rotation	11
2.3. Potentiel et régime de Thomas-Fermi	12
2.4. Analogie hydrodynamique	13
2.5. Vortex et anneau de vorticité	14
2.6. Réduction de dimensions	17
2.7. Adimensionnement	18
3. Identification des vortex	19
3.1. Principe de l'identification	20
3.2. Identification des vortex dans une simulation numérique 2D	21
3.3. Bibliothèque d'optimisation IPOPT	23
3.4. Identification des vortex dans une simulation numérique 3D	24
3.5. Identification des vortex dans les images expérimentales	26
3.6. Validation des algorithmes et résultats	28
3.6.1. Réseau d'Abrikosov 2D dense	29
3.6.2. Condensat de Bose-Einstein 3D	30
3.6.3. Vortex en noeud (vortex knot)	30
3.6.4. Ondes de Kelvin	31
3.6.5. Turbulence quantique en 3D	32
3.6.6. Réseau d'Abrikosov dans une image expérimentale	34
4. Résolution numérique de l'équation de Bogoliubov-De Gennes	35
4.1. Modèle de Bogoliubov-de Gennes	36
4.1.1. Modèle de Bogoliubov-de Gennes	36
4.1.2. États stationnaires de Gross-Pitaevskii	37
4.1.3. Condensats à deux composantes	38
4.1.4. Adimensionnement	40
4.2. Méthode de Newton pour la recherche des états stationnaires	41
4.2.1. État stationnaire à une composante	41
4.2.2. État stationnaire à deux composantes	42
4.3. Résolution de l'équation de Bogoliubov-de Gennes	43
4.4. Méthodes numériques	44

4.5.	Validation du code et résultats numériques	46
4.5.1.	État fondamental en 1D	46
4.5.2.	Soliton en 1D	47
4.5.3.	État fondamental en 2D	48
4.5.4.	Vortex en 2D	50
4.5.5.	Vortex central à partir de la limite linéaire	50
4.5.6.	Soliton à partir de la limite linéaire	54
4.5.7.	État fondamental en 3D	56
4.5.8.	Soliton noir en 3D	56
4.6.	Résultats numériques pour deux composantes	57
4.6.1.	État noir - anti-noir en 1D	58
4.6.2.	État vortex - vortex anti-noir en 2D	59
4.6.3.	État anneau de vortex - anneau de vortex anti-noir en 2D	60
4.6.4.	Bande de soliton noir-claire à partir de la limite linéaire	61
5.	Couplage des équations de Navier-Stokes et Gross-Pitaevskii	64
5.1.	Modélisation de l'hélium superfluide	64
5.1.1.	Le modèle HVBK	64
5.1.2.	Le modèle des filaments de vortex	65
5.2.	Couplage entre les équations de Gross-Pitaevskii et de Navier-Stokes	66
5.2.1.	Vitesse superfluide régularisée	66
5.2.2.	Calcul de la force de couplage	67
5.2.3.	Coefficients de friction	69
5.2.4.	Terme de couplage dans l'équation de Gross-Pitaevskii	69
5.2.5.	Dissipation et conservation de la masse	71
5.3.	Méthodes numériques	72
5.3.1.	Equations de Navier-Stokes	72
5.3.2.	Adimensionnement	73
5.3.3.	Algorithme pour l'évolution en temps	74
5.4.	Validation du modèle et sélection des paramètres	76
5.4.1.	Cristal de vortex	76
5.4.2.	Paire de vortex	78
5.4.3.	Anneau de vorticité	82
5.4.4.	Reconnection de deux anneaux de vortex	84
6.	Conclusion et perspectives	86
A.	Program architecture for the vortex identification toolbox	88
A.1.	Program architecture	88
A.2.	Macros and functions	90
A.3.	Input parameters	91
A.4.	Outputs	93
B.	Program architecture for the BdG toolbox	94
B.1.	Program architecture	94
B.2.	Macros and functions	95
B.3.	Input parameters	95
B.4.	Outputs	98

C. Program architecture for the Gross-Pitaevskii and Navier-Stokes coupling code	100
C.1. Program architecture	101
C.2. Main functions	102
C.3. Input parameters	104
C.4. Outputs	105
Bibliographie	106

1. Introduction

1.1. Hélium, superfluides et condensats de Bose-Einstein

Le 18 août 1868, l'astronome Jules Janssen observe une raie d'absorption à 587.49 nm dans le spectre du soleil ne correspondant à aucun des éléments chimiques connus sur Terre à l'époque. Il en déduit la présence sur le soleil d'un élément nouveau. En octobre de la même année, Norman Lockyer et Edward Frankland confirment l'observation et le nomment hélium. Suite à sa découverte sur Terre en 1895, de nombreuses études ont été consacrées à ce nouvel élément et notamment à son isotope le plus courant l'hélium-4 ${}^4\text{He}$. Parmi elles, on peut noter les expériences du néerlandais Heike Kamerlingh Onnes en 1908 qui en refroidissant le gaz parvient pour la première fois à obtenir de l'hélium liquide. Il observe alors avec son équipe un phénomène étrange : la capacité calorifique du liquide varie de façon discontinue autour de la température $T_\lambda = 2.2\text{K}$. En étudiant le diagramme de phase présenté en figure 1.1, il découvre que celui-ci est différent d'un diagramme classique (en encart) : l'hélium reste liquide à pression atmosphérique quand la température T tend vers 0K. La transition lambda sépare deux phases de l'hélium-4: l'hélium I ($T > T_\lambda$) et l'hélium II ($T < T_\lambda$).

En 1938, Allen, Misener (Allen and Misener, 1938) et Kapitza (Kapitza, 1938) découvrent une nouvelle caractéristique de l'hélium-II : sa viscosité est très faible. Par analogie avec la supraconductivité (découverte en 1911 par Kamerlingh Onnes), on nomme cette propriété la superfluidité. La première explication de ce phénomène est due à London en 1938 (London, 1938). Il propose un lien entre la superfluidité et le mécanisme de la condensation de Bose-Einstein. Il s'agit d'un état de la matière proposé par Satyendra Nath Bose (Bose, 1924) dans le cas des photons, puis étendu par Albert Einstein à un gaz dilué (Einstein, 1924). En étudiant les statistiques liées à la vitesse des particules quantiques, ils ont découvert que ces dernières ne suivent pas les mêmes lois que les particules classiques (la statistique de Maxwell-Boltzmann). A la place, ils établissent une nouvelle loi, dite de Bose-Einstein, décrivant le nombre de particules dans un état d'énergie E :

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) - 1}, \quad (1.1)$$

où k_B est la constante de Boltzman et μ le potentiel chimique. Cette équation s'applique aux particules de spin entier (les bosons) qui ne sont pas sujettes au principe d'exclusion de Pauli et peuvent donc occuper simultanément un même état quantique. En intégrant cette statistique, Bose et Einstein découvrent que puisque le nombre de particules N dans un état dépend de la température, il existe pour un N fixé une température critique T_c en dessous de laquelle les particules vont occuper l'ensemble des places disponibles dans les états excités. Si la température diminue, la population de l'état fondamental va alors augmenter jusqu'à représenter une proportion macroscopique du nombre total N .

La température critique peut être calculée:

$$T_c = 3.3 \frac{\hbar^2}{k_B m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}, \quad (1.2)$$

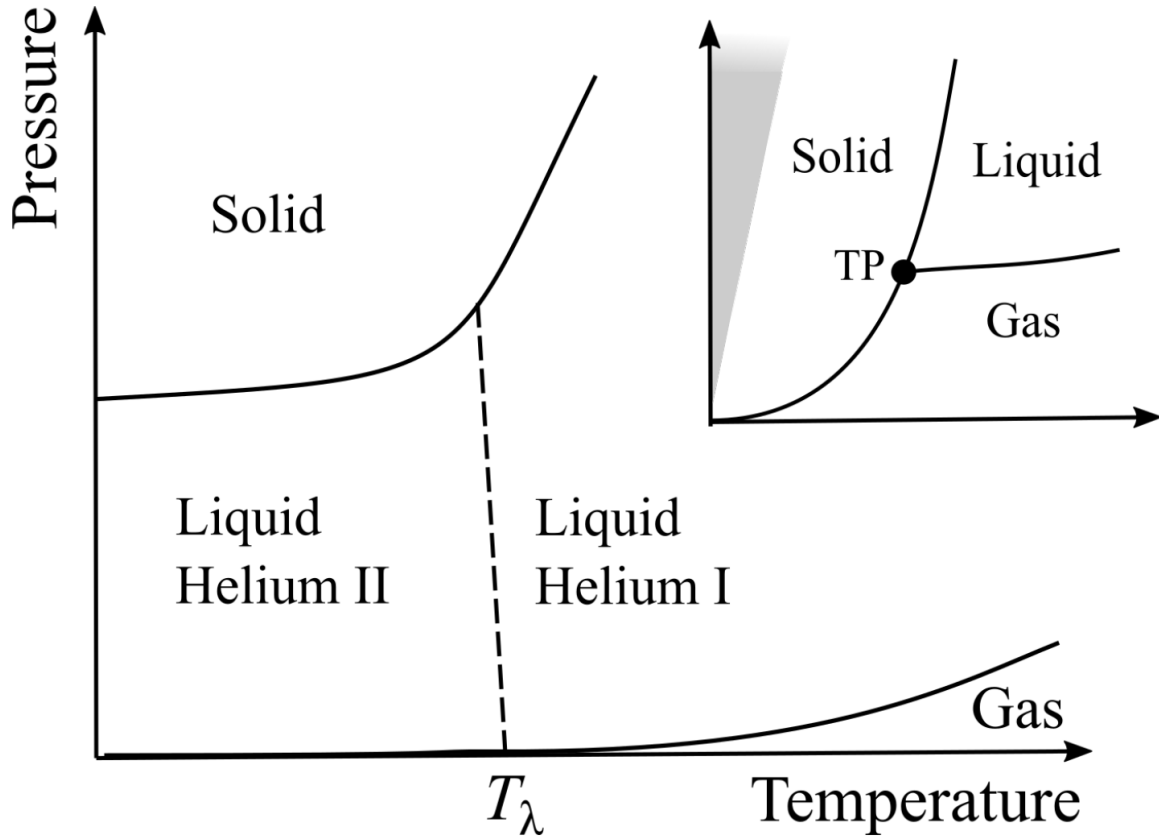


Figure 1.1.: Diagramme de phase de l'hélium 4: on observe deux phases liquides séparées par la transition lambda. L'encart est un diagramme de phase d'un matériau classique avec un point triple absent dans l'hélium. Image issue de [Barenghi and Parker \(2016\)](#).

avec m la masse des particules, $\hbar$ la constante de Planck réduite et V le volume occupé par le gaz. Le gaz de bosons est désormais nommé gaz de Bose, et on parle de condensats de Bose-Einstein pour décrire la fraction du gaz dans l'état de plus basse énergie. Ce phénomène est à l'époque complètement théorique car les températures nécessaires sont expérimentalement inaccessibles. Suite au développement des techniques de refroidissement par évaporation, puis par laser, les recherches expérimentales débutées dans les années 1970 ont fini par aboutir en 1995. Cette année là, Eric Cornell et Carl Wieman de l'université du Colorado à Boulder réalisent le premier condensat à partir d'un gaz de rubidium refroidit à 170nK ([Anderson et al., 1995](#)). Peu après, Wolfgang Ketterle obtient au MIT un condensat d'atomes de sodium ([Davis et al., 1995](#)). Pour ces réalisations, ils partagent le prix Nobel de physique en 2001.

D'un point de vue théorique, Gross et Pitaevskii ([Gross, 1961](#); [Pitaevskii, 1961](#)) ont développé une théorie de champ moyen en 1961 en approfondissant des principes introduits par Bogoliubov. Ils représentent le condensat par une fonction d'onde complexe $\psi(\mathbf{x}, t)$ dépendant de l'espace ($\mathbf{x}$) et du temps (t), gouvernée par une équation de Schrödinger non-linéaire. La phase de cette fonction d'onde permet de définir une vitesse:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} e^{iS(\mathbf{x}, t)}, \quad \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla S, \quad (1.3)$$

avec ρ la densité atomique et S la phase de la fonction d'onde. En ce qui concerne l'hélium II, un mois à peine après la suggestion de London, Tisza ([Tisza, 1938](#)) propose de le modéliser comme une combinaison d'un superfluide sans viscosité (noté s) et d'un fluide classique visqueux (noté n). Il prédit l'existence d'ondes de température dans le superfluide. Landau en 1941 développe ensuite un modèle à deux fluides pour décrire l'hélium II ([Landau, 1941](#)). Il renomme "second son" les ondes prédites par Tisza. Chaque composante est décrite par une densité (ρ_n et ρ_s) et une vitesse ($\mathbf{v}_n$ et $\mathbf{v}_s$). Les densités ρ_n et ρ_s dépendent de la température: $\rho_s = 0$ et $\rho_n = 1$ à $T = T_\lambda$ et $\rho_s = 1$ et $\rho_n = 0$ à $T = 0$. Le modèle à deux fluides proposé par Landau s'écrit alors:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_n = 0, \quad (1.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_s = 0, \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_n}{\partial t} + \mathbf{v}_n \cdot \nabla \mathbf{v}_n = -\frac{1}{\rho_n} \nabla p_n + \frac{1}{\rho_n} \mathbf{F}_{ns} + \nu_n \Delta \mathbf{v}_n, \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + \mathbf{v}_s \cdot \nabla \mathbf{v}_s = -\frac{1}{\rho_s} \nabla p_s - \frac{1}{\rho_s} \mathbf{F}_{ns}, \quad (1.7)$$

avec ν_n la viscosité et $\mathbf{F}_{ns}$ une force de couplage entre les fluides. C'est la modélisation de ce terme qui devient problématique. Un critère dû à Landau décrivant l'existence et la dissipation d'excitations dans un fluide permet de montrer que ces deux composantes n'interagissent pas directement entre elles. En étudiant la vorticit  des superfluides, Onsager ([Onsager, 1949](#)) puis Feynman ([Feynman, 1957](#)) pr disent l'existence de vortex (tourbillons) quantiques: le long d'un contour ferm  C , la circulation de la vitesse superfluide est quantifi e:

$$\int_C \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = \Gamma_v n, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (1.8)$$

avec $\Gamma_v = \frac{2\pi\hbar}{m}$ le quantum de circulation. Ces vortex sont d tect s indirectement   l'aide du second son par Hall et Vinen ([Hall et al., 1956a](#)) en 1956 puis directement par Packard et Sanders en 1972 ([Packard and Sanders, 1972](#)). Hall et Vinen ([Hall et al., 1956b](#)) postulent que les deux composantes de l'h lium interagissent via les vortex. Pour d crire le couplage $\mathbf{F}_{ns}$, une difficult  appara t due au caract re singulier de la vorticit  superfluide. Dans le mod le de Gross et Pitaevskii, l' quation (1.3) montre que $\boldsymbol{\omega}_s = \nabla \times \mathbf{v} = \nabla \times \nabla S$ est non nulle seulement l  o  la phase S est discontinue, et est donc singuli re. L'approche retenue est de consid rer des grandeurs moyenn e sur une  chelle sup rieure   la longueur inter-vortex. Feynman ([Feynman, 1971](#)) avait montr  que la vorticit  superfluide   grande  chelle ob issait   la relation suivante:

$$\boldsymbol{\omega}_s = \mathcal{L} \Gamma_v, \quad (1.9)$$

avec $\mathcal{L}$ la densit  volumique des lignes de vortex. Gr ce   cette relation, Hall et Vinen obtiennent alors l'expression suivante pour la force de friction mutuelle $\mathbf{F}_{ns}$, qui d pend de la vorticit  superfluide $\boldsymbol{\omega}_s = \nabla \times \mathbf{v}_s$ et est donn e par:

$$\mathbf{F}_{ns} = -\frac{B}{2} \frac{\rho_n \rho_s}{\rho} \frac{\boldsymbol{\omega}_s \times (\boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n))}{|\boldsymbol{\omega}_s|} - \frac{B'}{2} \frac{\rho_n \rho_s}{\rho} \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n), \quad (1.10)$$

B et B' sont des param tres d pendant de la temp rature et mesur s exp rimentalement. Cette expression suppose des lignes de vortex parall les (polaris es). Bekharevich et Khalatnikov ([Bekharevich and Khalatnikov, 1961](#)) ont ajout  un terme de tension pour prendre en compte des vortex courb s. Ces travaux forment la base du mod le de Hall-Vinen-Bekharevich-Khalatnikov (HVBK).

Dus à leur faible rayon (de l'ordre de l'angström), les vortex quantiques dans l'hélium sont difficiles à observer expérimentalement: les premières images ont été obtenues par Bewley en 2006 à l'aide de particules d'hydrogène (Bewley et al., 2006). Grâce à un rayon plus important (de l'ordre du micromètre), les vortex dans les condensats de Bose-Einstein sont plus facilement observables. En 2001, il a été montré expérimentalement que les vortex quantiques existent également dans les condensats de Bose-Einstein par Madison (Madison et al., 2001) en utilisant un laser pour mélanger le fluide. Abo-Schaeer (Abo-Schaeer et al., 2001) a pu vérifier la même année que les vortex s'organisent en un réseau triangulaire prédit par Abrikosov dans le cas des supraconducteurs (Abrikosov, 1957). L'image de ce réseau est reproduite en figure 1.2.

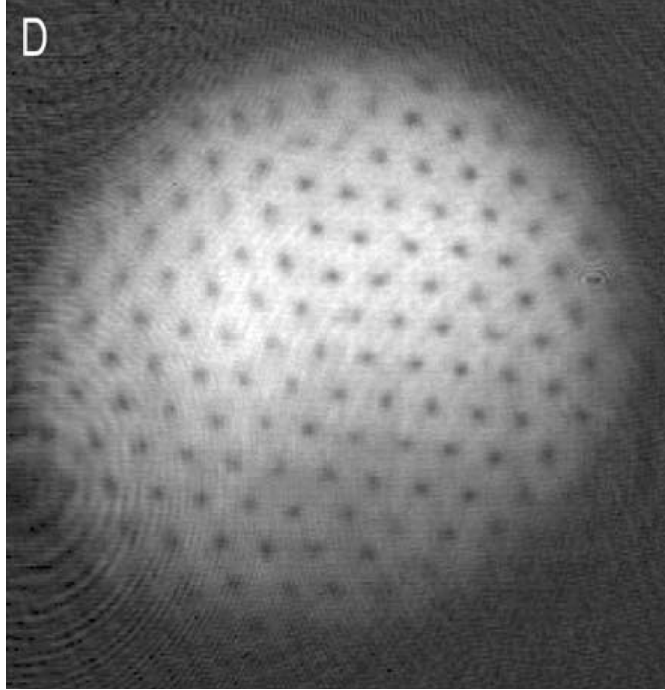


Figure 1.2.: Réseau de vortex quantiques d'Abrikosov dans un condensat de Bose-Einstein. Image issue de Abo-Schaeer et al. (2001).

1.2. Objectifs et problématiques de la thèse

1.2.1. Problématiques étudiées

Nous souhaitons réaliser des simulations numériques de condensats de Bose-Einstein et d'hélium superfluide en utilisant le modèle physique le plus répandu qui est celui de Gross-Pitaevskii (Gross, 1961; Pitaevskii, 1961; Pethick and Smith, 2008; Pitaevskii and Stringari, 2003). Depuis 1961, de nombreux articles ont été dédiés à l'étude mathématique de ce modèle. Lieb et al. ont notamment démontré l'existence et l'unicité de solutions (Lieb et al., 2001, 2005). Une vaste littérature est dédiée à la résolution numérique de l'équation de Gross-Pitaevskii. On peut distinguer deux types de problèmes:

- La recherche d'états stationnaires : il s'agit de trouver un état minimisant l'énergie de Gross-Pitaevskii. Il peut s'agir de l'état fondamental (le minimum global) ou d'états excités correspondant à des minima locaux. Deux approches existent pour la résolution de ce problème. La première est la minimisation de l'énergie de Gross-Pitaevskii. On

trouve ici des méthodes de minimisation par point intérieur (Vergez et al., 2016), de descente de gradient (Danaila and Kazemi, 2010) et de gradient conjugué (Danaila and Protas, 2017). L'autre approche est la résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii en temps imaginaire. On note l'utilisation de schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 (Caplan, 2013) ou d'ordre 3 couplé à un schéma de Crank-Nicolson (Aftalion and Danaila, 2003), d'un flot de gradient résolu par une méthode de splitting (Bao and Du, 2004) ou un schéma d'Euler semi-implicite (Antoine and Duboscq, 2014).

- La simulation de l'évolution dans le temps d'un état donné : c'est un problème instationnaire qui peut être résolu par une méthode de splitting (Bao and Wang, 2006) utilisant le domaine spectral ou des schémas de Crank-Nicolson (Bao and Cai, 2013), de Runge-Kutta d'ordre 4 (Caplan and Carretero-González, 2013) ou de relaxation (Besse, 2004) utilisant des différences finies.

Des méthodes utilisant des discrétisations par différences finies (Bao and Du, 2004; Caplan, 2013), par éléments finis (Aftalion and Danaila, 2003; Vergez et al., 2016), ou des méthodes spectrales (Bao and Du, 2004; Antoine and Duboscq, 2014; Bao and Wang, 2006) sont utilisées pour les problèmes stationnaires et instationnaires. Des codes Fortran, Matlab (Antoine and Duboscq, 2014; Caplan, 2013) ou FreeFem++ (Vergez et al., 2016) implémentant ces algorithmes sont distribués et permettent des simulations rapides et précises des phénomènes physiques ayant lieu dans les condensats et l'hélium superfluide.

Une fois la simulation effectuée, une étape de traitement des données est souvent nécessaire pour en extraire des informations. La connaissance de la position et des caractéristiques des vortex quantique est notamment nécessaire pour mieux comprendre les phénomènes de turbulence quantique. Les méthodes existantes (Villois et al., 2016; Liu et al., 2020) font le choix d'une grande précision, au prix d'un temps de calcul très élevé. Le développement de méthodes rapides et d'un code accessible pour le calcul de la position des vortex est le premier axe de cette thèse.

Le deuxième est l'étude de la stabilité des états stationnaires via le modèle de Bogoliobov-de Gennes. L'étude des excitations dans les condensats est un domaine actif de recherche, mais il n'existe pas de codes distribués pour ce problème. Nous cherchons à développer et distribuer un code utilisant une discrétisation par éléments finis calculant les modes de Bogoliubov-de Gennes de façon efficace. L'objectif est d'utiliser les bibliothèques interfacées avec FreeFem++ pour l'adaptation de maillage, le calcul des valeurs propres et la parallélisation afin de pouvoir étudier des états complexes en trois dimensions ou avec deux composantes.

Enfin, un troisième axe concerne la modélisation de l'hélium superfluide. A température finie, il peut être modélisé par une combinaison d'un superfluide et d'un fluide classique. Le couplage entre ces deux fluides est donné par la force (1.10), mais il est impossible de résoudre directement le système (1.4) du fait de la grande différence d'échelle entre les structures du superfluide (les vortex sont de l'ordre de l'angström) et celles du fluide normal (la taille du récipient varie entre le décimètre et le mètre). Le modèle HVBK contourne ce problème en considérant une vorticit   superfluide moyenn  e pour obtenir une description m  soscopique de l'h  lium. Les mod  les propos  s par Galantucci et al. (2020) et Inui and Tsubota (2021) couplent un fluide normal mod  lis   par l'  quation de Navier-Stokes incompressible avec un superfluide mod  lis   par la m  thode des filaments de vortex . Cela permet une prise en compte de l'interaction dans les deux directions (l'influence du superfluide sur le fluide normal mais aussi celle du fluide normal sur le superfluide). Le probl  me de l'approche par filaments de vortex est qu'elle utilise des mod  les ph  nom  nologiques pour la reconnection (croisement et   change de branche entre deux lignes de vortex), ph  nom  ne qui est directement pris en compte par le mod  le de Gross-Pitaevskii. Nous proposons un autre mod  le couplant ce dernier avec l'  quation de Navier-Stokes afin de prendre en compte ces ph  nom  nes    petite   chelle.

1.2.2. Objectifs de la thèse

Les deux principaux outils utilisés lors de cette thèse sont le logiciel FreeFem++ (Hecht, 2012) et le code GPS (Parnaudeau et al., 2015). Le premier est un logiciel d'éléments finis permettant une manipulation simple des fonctions éléments finis grâce à une syntaxe proche du formalisme mathématique des équations aux dérivées partielles. Il peut être interfacé avec de nombreuses bibliothèques pour la résolution de systèmes linéaires, le calcul de valeurs propres, l'optimisation ou encore la parallélisation d'algorithmes. Cela permet un accès aisé à des méthodes numériques représentant l'état de l'art tout en gardant la simplicité d'utilisation de FreeFem++. Parmi les fonctionnalités proposées par FreeFem++ et les bibliothèques qui y sont intégrées, l'adaptation de maillage permet de réduire le nombre de degrés de liberté d'un problème, et donc le temps de calcul associé, tout en gardant un haut niveau de précision. GPS est un code Fortran parallèle, utilisant MPI et OpenMP afin de résoudre numériquement l'équation de Gross-Pitaevskii pour des problèmes stationnaires et instationnaires. À partir de ces outils, les objectifs de la thèse ont été les suivants:

- Pour l'identification des vortex:
 1. Mettre au point une méthode rapide de détection des vortex dans une simulation numérique 2D adaptée au cas de maillages non uniformes, puis étendre cette méthode aux lignes de vortex dans une simulation 3D.
 2. Calculer différentes propriétés des vortex: position, rayon, courbure, spectre, etc. et caractériser la précision des algorithmes en les comparant aux cas tests proposés par Villois et al. (2016).
 3. Adapter les méthodes proposées pour identifier les vortex dans des images expérimentales de condensats.
 4. Mettre en forme les codes FreeFem++ pour former une toolbox simple à prendre en main et interfaçable avec les codes de résolution de Gross-Pitaevskii comme GPS.
- Pour la résolution du système de Bogoliubov-de Gennes (BdG):
 1. Obtenir des états stationnaires de l'équation de Gross-Pitaevskii à l'aide d'une méthode de Newton, étudier la stabilité de ces états en résolvant le problème aux valeurs propres de BdG à l'aide de la bibliothèque ARPACK (Lehoucq et al., 1998).
 2. Étendre le code aux problèmes en trois dimensions et aux condensats à deux composantes. Utiliser l'adaptation de maillage afin de réduire la taille des systèmes étudiés.
 3. Tester ces codes sur différentes configurations 1D, 2D et 3D présentées dans la littérature. Vérifier les propriétés attendues des valeurs propres et comparer les résultats avec ou sans adaptation de maillage.
 4. Paralléliser le code en utilisant les bibliothèques PETSc (Balay et al., 1997, 2022a,b) et SLEPc (Hernández et al., 2003) pour étudier des problèmes 3D complexes.
 5. Assembler les codes en deux toolbox (codes séquentiels et parallèles) facilement utilisables et modifiables.

- Pour la modélisation et la simulation de la friction mutuelle dans l'hélium superfluide:
 1. Compléter le code GPS pour résoudre simultanément les équations de Gross-Pitaevskii et Navier-Stokes, valider le fonctionnement du code sur des exemples connus.
 2. Obtenir une vitesse superfluide régulière $\mathbf{v}_s^{reg}$ à partir de la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii ayant un rôle analogue au champ de vitesse obtenu dans le modèle des lignes de vortex.
 3. Calculer à partir de $\mathbf{v}_s^{reg}$ le terme de friction à intégrer dans l'équation de Navier-Stokes, simuler numériquement le couplage obtenu (dans une direction) et le comparer aux résultats connus.
 4. Modéliser le terme de couplage à inclure dans Gross-Pitaevskii en s'inspirant des travaux de Coste (1998) et l'ajouter dans GPS
 5. Vérifier la bonne implémentation du modèle et déterminer les coefficients numériques à partir de cas connus analytiquement pour un couplage à une direction.
 6. Utiliser ce modèle pour étudier des cas de reconnection de vortex.

1.3. Organisation du mémoire

Dans le chapitre 2, je présente l'équation de Gross-Pitaevskii, en commençant par une justification du modèle dans le cadre d'un gaz de Bose dilué, puis en introduisant l'énergie et l'équation de Gross-Pitaevskii avec rotation dans les cas stationnaires et instationnaires. Je discute ensuite du rôle du potentiel de piégeage et de son importance dans le régime de Thomas-Fermi. La section suivante permet de faire le lien entre la fonction d'onde de Gross-Pitaevskii et les quantités hydrodynamiques que sont la vitesse et la densité. Ce lien est particulièrement important pour comprendre l'utilisation de l'équation de Gross-Pitaevskii pour la modélisation de l'hélium superfluide. C'est ici qu'est introduite la notion de vortex, qui sera centrale dans tout ce manuscrit. Enfin, je conclue ce chapitre par deux discussions, la première sur la réduction de dimension permettant de considérer des problèmes en une et deux dimensions, la seconde sur l'adimensionnement utilisé pour l'étude numérique de l'équation.

Le chapitre 3 présente les méthodes mises au point pour l'identification des vortex dans les condensats, en commençant par une présentation des méthodes existantes. Les principes généraux de l'identification sont présentés dans la première section en faisant le lien avec les caractéristiques des vortex introduites dans le chapitre précédent. Les trois sections suivantes portent sur les approches utilisées dans les simulations numériques en deux puis trois dimensions ainsi que dans les images expérimentales. Les algorithmes proposés sont basés sur une discrétisation par éléments finis et ont été implémentés grâce au logiciel FreeFem++ (Hecht, 2012). Différentes caractéristiques du vortex sont calculées. L'estimation du rayon des vortex en deux dimensions nécessite notamment l'utilisation de la bibliothèque de minimisation IPOPT (Wächter and Biegler, 2006) dont le fonctionnement est brièvement présenté. Le chapitre se termine par une discussion des différents cas tests utilisés pour valider le fonctionnement des codes et caractériser leur efficacité en terme de précision et de temps de calcul. Je reprends notamment les cas tests présentés par Villos et al. (2016) pour l'identification des lignes de vortex en trois dimensions.

Le chapitre 4 concerne l'étude de la stabilité des excitations dans les condensats par le modèle de Bogoliubov-de Gennes, qui est une linéarisation autour d'un état stable de l'équation de Gross-Pitaevskii. L'introduction du chapitre présente un panorama des différents résultats numériques existants dans la littérature sur ce modèle. Après un rappel sur les solutions stationnaires de l'équation de Gross-Pitaevskii, le problème aux valeurs propres de Bogoliubov-de Gennes pour les condensats est présenté. Cette discussion est ensuite étendue aux condensats à deux composantes. La description du problème suit et est séparée en deux parties. La première est la recherche des états stables des condensats par une méthode de Newton, puis le problème aux valeurs propres de Bogoliubov-de Gennes. Ces problèmes sont résolus dans deux codes FreeFem++, l'un séquentiel, l'autre parallèle. Leur fonctionnement basé sur différentes bibliothèques de parallélisation, d'adaptation de maillage et de résolution de systèmes linéaires est détaillé. Différents cas tests permettent de valider le fonctionnement des codes en comparant les valeurs propres obtenues aux résultats de la littérature (Kevrekidis and Pelinovsky, 2010; Law et al., 2002; Middelkamp et al., 2010b; Bisset et al., 2015a; Danaila et al., 2016).

Le chapitre 5 décrit le couplage des équations de Gross-Pitaevskii et de Navier-Stokes pour la modélisation de la friction mutuelle dans l'hélium superfluide. La première section présente les modèles HVBK (Hall et al., 1956a) et les couplages basés sur la méthode des filaments de vortex (Galantucci et al., 2020; Inui and Tsubota, 2021) pour la simulation numérique de l'hélium superfluide. Je présente ensuite les différentes étapes de construction du modèle : la régularisation de la vitesse superfluide, le calcul de la force de couplage et des coefficients de friction puis l'introduction d'un terme de couplage dans l'équation de Gross-Pitaevskii. La section suivante concerne les méthodes numériques utilisées pour la simulation numérique des équations couplées et la préparation des solutions initiales. La détermination des différents paramètres numériques et la vérification du fonctionnement du modèle sur différents cas tests en deux et trois dimensions (cristal de vortex, paire de vortex, anneau de vorticité) occupe la section suivante. Enfin le modèle est utilisé pour étudier des cas de reconnection de vortex.

Le chapitre 6 de conclusion fait le point sur les objectifs atteints au cours de la thèse et évoque différentes perspectives possibles pour aller plus loin dans l'étude des sujets abordés.

2. Modélisation des superfluides par l'équation de Gross-Pitaevskii

2.1. Équation de Gross-Pitaevskii pour un gaz de Bose dilué

Le modèle de Gross-Pitaevskii, développé indépendamment par Gross (1961) et Pitaevskii (1961) est utilisé pour décrire les condensats de Bose-Einstein. Voici une dérivation de l'équation de Gross-Pitaevskii introduite par Pethick and Smith (2008). Commençons par l'équation de Schrödinger linéaire décrivant l'évolution temporelle de la fonction d'onde à une particule $\Psi(\mathbf{x}, t)$ dans un système décrit par un hamiltonien $\mathcal{H}$ comprenant un terme d'énergie cinétique et un potentiel extérieur V_{trap} :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathcal{H}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V_{\text{trap}}(\mathbf{x})\Psi. \quad (2.1)$$

Si le hamiltonien ne dépend pas du temps, en écrivant la séparation des variables $\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})\phi(t)$, on déduit que ψ obéit à l'équation de Schrödinger stationnaire:

$$\mathcal{H}\psi = E\psi, \quad (2.2)$$

avec E l'énergie du système (pour la partie temporelle, on a $\phi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$). Les solutions sont les états propres ψ_n du hamiltonien, associés aux valeurs propres E_n , $n \in \mathbb{N}$. En écrivant l'énergie associée à la valeur moyenne du hamiltonien:

$$\mathcal{E}(\Psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi^* \mathcal{H} \Psi d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \Psi|^2 + V_{\text{trap}} |\Psi|^2 \right) d\mathbf{x}, \quad (2.3)$$

on observe que le membre de droite de l'équation (2.1) s'obtient en dérivant cette énergie:

$$\mathcal{H}\Psi = \frac{\delta \mathcal{E}(\Psi)}{\delta \bar{\Psi}}, \text{ avec } \bar{\Psi} \text{ le complexe conjugué.} \quad (2.4)$$

L'interprétation de Ψ en terme de probabilités permet d'introduire la contrainte de normalisation:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 1. \quad (2.5)$$

Pour décrire un gaz de Bose à travers l'équation de Schrödinger, il est nécessaire de passer de la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{x}, t)$ décrivant une particule à la fonction $\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t)$ décrivant N particules. Intéressons nous au cas de deux particules n'interagissant pas. Le hamiltonien $\mathcal{H}$ de ce système peut s'écrire comme la somme de deux hamiltoniens $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}_2$ agissant sur chacune des particules. Le problème s'écrit:

$$(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2)\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = E\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \quad (2.6)$$

Il paraît naturel d'écrire l'état à deux particules comme:

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_n(\mathbf{x}_1)\psi_m(\mathbf{x}_2), \quad m, n \in \mathbb{N},$$

avec ψ_n et ψ_m des états propres des hamiltoniens $\mathcal{H}_1$ et $\mathcal{H}_2$. Cette expression n'est valide que dans le cas de bosons (c'est à dire que l'on a une fonction d'onde symétrique: $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$). L'état fondamental devient:

$$\psi_B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \psi_1(\mathbf{x}_1)\psi_1(\mathbf{x}_2). \quad (2.7)$$

La fonction d'onde à N particules dans l'état fondamental s'écrit alors:

$$\Psi_B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, t) = \prod_{i=1}^N \Psi_1(\mathbf{x}_i, t). \quad (2.8)$$

L'absence d'interactions dans le gaz de Bose idéal limite l'utilisation de ce modèle. En pratique, il est nécessaire de considérer des interactions $U_{int}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = U_{int}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)$ entre les particules. Le hamiltonien devient alors:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{x}_j}^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{x}_j) + \sum_{1 \leq k < j \leq N} U_{int}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j). \quad (2.9)$$

Dans le cas d'interactions faibles, on peut faire l'approximation de Hartree en considérant que la relation (2.8) reste valide et en représentant le système par le champ moyen ψ_1 , ce qui revient à négliger les fluctuations quantiques de l'état fondamental. L'énergie $\mathcal{E}$ devient:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\psi_B) &= \int_{(\mathbb{R}^3)^N} \overline{\Psi_B}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, t) \mathcal{H} \Psi_B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N, t) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N \\ &= N \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) |\psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \\ &\quad + \frac{N(N-1)}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1(\mathbf{x}', t)|^2 U_{int}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') |\psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}' d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Avec le changement de variable $\psi_1 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}}\psi$ et en considérant un grand nombre de particules ($\frac{N-1}{N} \sim 1$), on peut simplifier l'expression:

$$\begin{aligned} \mathcal{E} &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x}', t)|^2 U_{int}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}' d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

A faible énergie et dans le cas d'un gaz dilué, le potentiel d'interactions peut être remplacé par le pseudo-potentiel de Fermi:

$$U_{int}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(\mathbf{x}) = g\delta(\mathbf{x}), \quad (2.10)$$

avec a_s la longueur de diffusion, m la masse d'un boson et $\delta(\mathbf{x})$ la masse de Dirac. **Castin (2001)** décrit de façon détaillée le passage au pseudo-potentiel. On considère en général des interactions répulsives ($g > 0$) pour lesquelles il existe un minimum de l'énergie (et donc un état fondamental) quelle que soit la valeur de g . Dans le cas d'interactions attractives, il existe une limite supérieure N_0 au nombre d'atome N dans le condensat, et l'état stable n'existe qu'en dessous de cette limite. Au dessus de N_0 , il n'y a plus de solutions stables et le système tend à se concentrer en un point. Les forces inter-atomiques deviennent alors importantes et le condensat explose en un phénomène de bosenova.

On obtient finalement l'expression finale de l'énergie de Gross-Pitaevskii:

$$E = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\psi(\mathbf{x}, t)|^4 \right) d\mathbf{x}. \quad (2.11)$$

L'équation de Gross-Pitaevskii est obtenue en dérivant l'énergie (2.11):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\delta \mathcal{E}(\psi)}{\delta \bar{\psi}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V_{\text{trap}} \psi + g |\psi|^2 \psi. \quad (2.12)$$

La normalisation (2.5) devient une mesure du nombre d'atomes N dans le système:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 d\mathbf{x} = N. \quad (2.13)$$

Pitaevskii and Stringari (2003) discutent de l'utilisation de ce modèle dans le cas de l'hélium superfluide, où les suppositions effectuées (gaz dilué et faibles interactions) ne s'appliquent pas. On trouve dans ce même livre une autre dérivation de l'équation (2.12) utilisant la représentation d'Heisenberg de l'opérateur champ. Bien qu'il ne s'agisse dans le cadre de l'hélium que d'un modèle phénoménologique, l'utilisation de l'équation de Gross-Pitaevskii a permis l'étude de nombreux phénomènes observés expérimentalement (existence et reconnection de vortex, spectres de turbulence, etc.). Des extensions ont été proposées pour l'étude de l'hélium à température finie (Berloff et al., 2014).

2.2. Énergie et équation de Gross-Pitaevskii avec rotation

Parmi les expériences réalisées dans les condensats, une grande attention a été apportée aux vortex quantiques apparaissant dans les systèmes en rotation. Pour modéliser cette situation, il est plus commode de se placer dans le référentiel tournant. Dans ce cas, l'énergie du condensat devient:

$$E'(\psi) = E(\psi) - \mathcal{L}(\psi) \cdot \boldsymbol{\Omega}, \quad (2.14)$$

avec $\boldsymbol{\Omega}$ la vitesse de rotation et $\mathcal{L}(\psi)$ le moment cinétique:

$$\mathcal{L}(\psi) = \mathbf{x} \times \mathbf{p}(\psi) = \mathbf{x} \times (-i\hbar \nabla) \psi. \quad (2.15)$$

En général, on considère un condensat en rotation autour de l'axe z . On a alors $\boldsymbol{\Omega} = \Omega \mathbf{e}_z$ avec $\mathbf{e}_z$ le vecteur directeur unitaire dans la direction z . Le moment cinétique devient:

$$\mathcal{L}(\psi) \cdot \boldsymbol{\Omega} = \Omega \mathcal{L}_z(\psi) = i\hbar \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \quad (2.16)$$

$$= i\hbar \Omega A^T \nabla \psi, \quad \text{avec} \quad A^T = (y, -x, 0). \quad (2.17)$$

L'énergie dans le référentiel tournant peut donc s'écrire:

$$E'(\psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 + V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{g}{2} |\psi(\mathbf{x}, t)|^4 \right) d\mathbf{x} - \Omega L_z, \quad (2.18)$$

avec L_z le moment angulaire:

$$L_z = i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} \bar{\psi} A^T \nabla \psi. \quad (2.19)$$

Par la relation (2.12), on obtient alors l'équation de Gross-Pitaevskii avec le terme de rotation:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V_{\text{trap}} \psi + g |\psi|^2 \psi - i\hbar \Omega A^T \nabla \psi. \quad (2.20)$$

En plus de ce terme de rotation, l'énergie peut être décomposée de la façon suivante:

- l'énergie cinétique:

$$E_{kin} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}, \quad (2.21)$$

- l'énergie potentielle:

$$E_{pot} = \int_{\mathbb{R}^3} V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}, \quad (2.22)$$

- l'énergie d'interaction:

$$E_{int} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{g}{2} |\psi(\mathbf{x}, t)|^4 d\mathbf{x}. \quad (2.23)$$

En multipliant l'équation (2.20) par $\bar{\psi}$ avant d'intégrer puis de prendre la partie imaginaire, on peut montrer que le nombre d'atome N est conservé. Si en plus le potentiel V_{trap} ne dépend pas du temps, alors l'énergie (2.18) est également conservée (pour le montrer, il faut multiplier l'équation (2.20) par $\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}$ avant d'intégrer et de prendre la partie réelle). L'état fondamental ψ_g est le minimum global de l'énergie (2.18), sous la contrainte (2.13):

$$\psi_g = \min_{\|\psi\|^2=N} \mathcal{E}(\psi). \quad (2.24)$$

Une problématique importante est la recherche de cet état fondamental. Des états excités correspondant à des minimums locaux peuvent aussi être recherchés. Si l'on s'intéresse à une solution stationnaire de l'équation (2.20), il est possible d'utiliser l'ansatz $\psi(\mathbf{x}, t) = \phi(\mathbf{x}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mu t}$ où $\phi(\mathbf{x})$ est solution de l'équation de Gross-Pitaevskii stationnaire:

$$\mu \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V_{\text{trap}} \phi + g |\phi|^2 \phi - i \hbar \Omega A^T \nabla \phi. \quad (2.25)$$

avec μ le potentiel chimique fixé par la normalisation (2.13):

$$\mu = \frac{1}{N} \left(\mathcal{E}(\psi) + \frac{g}{2} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^4 d\mathbf{x} \right). \quad (2.26)$$

Ces états stationnaires correspondent à des minimums de l'énergie (2.18).

2.3. Potentiel et régime de Thomas-Fermi

Le potentiel externe V_{trap} est généralement harmonique:

$$V_{\text{trap}} = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (2.27)$$

Les longueurs caractéristiques associées à ce potentiel sont les longueurs des oscillateurs harmoniques $a_i^{ho} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_i}}$, $i = x, y, z$. Le régime de fortes interactions, atteint lorsque $\frac{N a_s}{a^{ho}} \gg 1$ est connu sous le nom de régime de Thomas-Fermi ($a^{ho} = \max(a_x^{ho}, a_y^{ho}, a_z^{ho})$). Il correspond au cas où l'énergie cinétique devient négligeable par rapport à l'énergie d'interaction. Dans ce cas, on peut négliger le laplacien dans l'équation de Gross-Pitaevskii (approximation de Thomas-Fermi) pour obtenir:

$$\mu \psi = V_{\text{trap}} \psi + g |\psi|^2 \psi. \quad (2.28)$$

La densité atomique de Thomas-Fermi s'exprime comme:

$$n_{TF}(\mathbf{x}) = |\psi_{TF}(\mathbf{x})|^2 = \frac{1}{g} (\mu - V_{\text{trap}}(\mathbf{x})). \quad (2.29)$$

On considère $n_{TF}(\mathbf{x}) = 0$ si $V(\mathbf{x}) > \mu$ pour avoir une densité positive. Cette densité est une bonne approximation de l'état fondamental dans le régime de Thomas-Fermi, la différence étant au bord du condensat, où le laplacien n'est plus négligeable. Pour le potentiel harmonique, la densité $n_{TF}(\mathbf{x})$ s'annule sur une ellipse en 2D ou un ellipsoïde en 3D définie par $\mu = V_{\text{trap}}(\mathbf{x})$. Les rayons R_x^{TF} , R_y^{TF} et R_z^{TF} de l'ellipse donnent une approximation de la taille du condensat et sont donnés par:

$$R_i^{TF} = \frac{1}{\omega_i} \sqrt{\frac{2\mu}{m}}, \quad i = x, y, z. \quad (2.30)$$

Si le système est en rotation ($\Omega \neq 0$), il faut utiliser un potentiel effectif $V_{\text{trap}}^{eff}(\mathbf{x})$ pour prendre en compte la force centrifuge dans le calcul de n_{TF} :

$$V_{\text{trap}}^{eff}(\mathbf{x}) = V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2}m\Omega^2(x^2 + y^2). \quad (2.31)$$

Il existe une vitesse de rotation maximum $\Omega_{\text{max}} = \min(\omega_x, \omega_y)$ au delà de laquelle le condensat n'est plus piégé par le potentiel ($V_{\text{trap}}^{eff} < 0$). Pour étudier le régime des grandes rotations, il a été suggéré par [Bretin et al. \(2004\)](#) d'utiliser un laser pour confiner plus fortement le condensat. Le potentiel apporté par le laser est modélisé par une gaussienne. Une bonne approximation est obtenue en ne gardant que les premiers termes du développement en série de Taylor de l'exponentielle:

$$V_{\text{trap}} = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + U_2 \left(\frac{r}{\omega_2} \right)^2 + U_4 \left(\frac{r}{\omega_4} \right)^4, \quad r^2 = x^2 + y^2. \quad (2.32)$$

U_2 , U_4 , ω_2 et ω_4 caractérisent le potentiel apporté par le laser, qui comporte un terme quartique ainsi qu'une contribution quadratique. Des expressions pour n_{TF} pour les potentiels quadratiques (2.27) et quartique $\pm$ quadratique (2.32) sont présentées par [Vergez et al. \(2016\)](#).

Le potentiel est associé à l'invariance de jauge de l'équation de Gross-Pitaevskii. En effet, la fonction d'onde est définie à un facteur de phase près, modifiable par translation du potentiel:

$$V_{\text{trap}} \rightarrow V_{\text{trap}} + a \implies \psi \rightarrow \psi e^{-i\frac{a}{\hbar}t}, \quad a \in \mathbb{R}. \quad (2.33)$$

2.4. Analogie hydrodynamique

Il est possible de lier l'équation de Gross-Pitaevskii à la mécanique des fluides grâce à la transformée de Madelung qui consiste à écrire la fonction d'onde comme:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{n(\mathbf{x}, t)} e^{iS(\mathbf{x}, t)}, \quad (2.34)$$

où $n(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ représente la densité atomique et $S(\mathbf{x}, t)$ est la phase de la fonction d'onde. Ces quantités permettent de définir la densité massique:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = mn(\mathbf{x}, t) = m|\psi(\mathbf{x}, t)|^2, \quad (2.35)$$

et la vitesse:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S = \frac{\hbar}{m} \frac{\bar{\psi} \nabla \psi - \psi \nabla \bar{\psi}}{2i}. \quad (2.36)$$

On peut alors transformer l'équation (2.20) en un système:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla (\mathbf{v}^2) = -\frac{1}{m} \nabla (gn + V_{\text{trap}}) + \frac{\hbar^2}{2m^2} \nabla \left(\frac{\nabla^2(\sqrt{\rho})}{\sqrt{\rho}} \right). \quad (2.38)$$

Le deuxième terme du membre de droite de (2.38) est un terme de pression quantique caractéristique de l'origine quantique du système. En le négligeant, et en l'absence de potentiel externe, les équations (2.37) et (2.38) sont les équations d'Euler décrivant un fluide sans viscosité. Pour le voir, il faut réécrire le premier terme du membre de droite de (2.38) comme:

$$\frac{1}{m} \nabla(gn) = \frac{1}{m^2} \nabla(g\rho) = \frac{1}{\rho} \nabla\left(\frac{g\rho^2}{2m^2}\right), \quad (2.39)$$

ce qui fait apparaître la pression $P = \frac{g\rho^2}{2m^2}$. La longueur de cicatrisation ξ est l'échelle de longueur à laquelle les termes de pression et de pression quantique se compensent. Elle est donnée par:

$$\frac{g\rho}{m^2} = \frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{\sqrt{\rho}}{\xi^2 \sqrt{\rho}} \implies \xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2g\rho}}. \quad (2.40)$$

On peut également la déterminer en compensant les termes d'énergie cinétique et d'interaction dans l'équation (2.20):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi}{\xi^2} = g|\psi|^2\psi \implies \xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2mg|\psi|^2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2g\rho}}. \quad (2.41)$$

On en déduit que les termes de pression quantique et d'énergie cinétique sont négligeables à grande échelle. Avec les grandeurs hydrodynamiques, l'énergie (2.18) s'écrit:

$$\mathcal{E} = \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\hbar^2}{2m^2} |\nabla \sqrt{\rho}|^2 + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 + \frac{\rho}{m} V_{\text{trap}} + \frac{g\rho^2}{2m^2} \right) d\mathbf{x}. \quad (2.42)$$

Pour avoir une idée des différentes échelles à l'oeuvre dans les condensats, on peut s'intéresser aux expériences de [Abo-Shaeer et al. \(2001\)](#):

- Le condensat contient $5 \cdot 10^7$ atomes de sodium ^{23}Na (de masse atomique $22.99u$). La longueur de diffusion est $a_s = 2.8[nm]$ et la température critique est de l'ordre de $2[\mu K]$.
- Le potentiel chimique est mesuré à $\mu = 310 \cdot 10^{-9} k_B [J]$, avec k_B la constante de Boltzmann.
- Le potentiel est caractérisé par les fréquences $\omega_z = 20 \cdot 2\pi[\text{Hz}]$ et $\omega_x = \omega_y = 84 \cdot 2\pi[\text{Hz}]$.
- Les échelles de longueurs associées au potentiel sont $a_z^{ho} \approx 4.7[\mu m]$, $a_x^{ho} = a_y^{ho} \approx 2.3[\mu m]$.
- Le rayon de Thomas-Fermi dans la direction radiale est $R_x^{TF} = R_y^{TF} \approx 29[\mu m]$ et la longueur de cicatrisation vaut $\xi \approx 0.2[\mu m]$.
- La densité maximale est mesurée à $n = 4.3e14 [\text{atomes}/cm^3]$, ce qui permet d'évaluer la distance entre atomes à $n^{-\frac{1}{3}} \approx 132[nm]$.

On a donc l'ordre suivant:

$$a_s \ll n^{-\frac{1}{3}} < \xi \ll a^{ho} \ll R^{TF}. \quad (2.43)$$

Dans l'hélium, les échelles de longueurs sont plus grandes puisque la longueur de cicatrisation est de l'ordre de $1\text{\AA}$ alors que les conteneurs utilisés dans les expériences vont du dm^3 au m^3 .

2.5. Vortex et anneau de vorticit 

L'équation (2.36) indique que le superfluide est irrotationnel si la densité est non nulle:

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v} = \frac{\hbar}{m} \nabla \times \nabla S = 0. \quad (2.44)$$

Si l'on calcule la circulation de la vitesse Γ le long d'une courbe fermée C , on obtient:

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} \oint_C \nabla S \cdot d\mathbf{l}. \quad (2.45)$$

Il est possible d'avoir $\Gamma \neq 0$ dans le cas où la phase varie d'un multiple de 2π le long du contour C . Puisque ce raisonnement ne dépend pas de C , cela signifie qu'il existe un point à l'intérieur du domaine où la phase varie d'un multiple de 2π . Pour garantir l'existence de la fonction d'onde, la densité ρ doit être nulle en ce point. La circulation est donc:

$$\Gamma = \frac{h}{m} \kappa, \quad \kappa \in \mathbb{N}. \quad (2.46)$$

On obtient ici une caractéristique importante des superfluides: le fait que la circulation de la vitesse est quantifiée. Les points (en 2D) ou lignes (en 3D) où la densité s'annule forment des défauts de phase nommés vortex. La vorticité du superfluide donnée par l'équation (2.44) est singulière: en prenant en compte la contribution des vortex, on obtient:

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{h}{m} \int \frac{d\mathbf{s}}{d\sigma}(\sigma) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{s}(\sigma)) d\sigma, \quad (2.47)$$

avec $\mathbf{s}$ la position de la ligne de vortex et σ l'abscisse curviligne. En coordonnées cylindriques (r, θ, z) , la fonction d'onde associée à une ligne de vortex droite et centrée en $(0, 0)$ est donnée par $\psi_v = |\psi_v| e^{i\kappa\theta}$. L'équation (2.36) indique que la vitesse autour du vortex est alors purement tangentielle:

$$\mathbf{v}_v = \frac{\hbar\kappa}{mr} \mathbf{e}_\theta. \quad (2.48)$$

En remplaçant ψ_v dans l'équation de Gross-Pitaevskii, on peut montrer que le profil du vortex est solution de:

$$\frac{-1}{\eta} \frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{df}{d\eta} \right) + f \left(\frac{\kappa^2}{\eta^2} - 1 \right) + f^3 = 0, \quad (2.49)$$

avec $|\psi_v| = \sqrt{n_0} f(\eta)$, $\eta = \frac{r}{\xi}$ et n_0 la densité en l'absence de vortex. Les conditions aux limites sont $f(0) = 0$ et $f(\infty) = 1$ (la densité est nulle à l'emplacement du vortex et on retrouve une densité uniforme à l'infini). La longueur de cicatrisation ξ donne une bonne approximation du rayon du vortex. Le signe du quantum de circulation κ donne le sens de rotation. [Takeuchi et al. \(2018\)](#) ont montré que les vortex dont le quantum de circulation κ (aussi nommé charge) est différent de ± 1 sont dynamiquement instables. C'est pour cette raison que les vortex étudiés dans la suite sont de charge ± 1 . L'inexistence d'une expression analytique pour le profil du vortex rend nécessaire l'utilisation d'approximations de $|\psi_v|$ pour la construction de solutions initiales de simulations numériques. Des approximants de Padé ont ainsi été proposés par [Berloff \(2004\)](#) et [Rorai et al. \(2013\)](#). On a par exemple le profil suivant:

$$|\psi_v|^2 \approx \frac{a_1 \left(\frac{r}{\xi}\right)^2 + a_2 \left(\frac{r}{\xi}\right)^4}{1 + b_1 \left(\frac{r}{\xi}\right)^2 + a_2 \left(\frac{r}{\xi}\right)^4}. \quad (2.50)$$

avec:

$$a_1 = \frac{73 + 3\sqrt{201}}{352}, \quad a_2 = \frac{6 + \sqrt{201}}{528}, \quad b_1 = \frac{21 + \sqrt{201}}{96}. \quad (2.51)$$

Les figures 2.1a et 2.1b présentent les profils de densité et de phase d'un vortex au centre d'un condensat en deux dimensions. On observe le défaut de phase au centre du condensat et la zone de basse densité autour du vortex. Le profil de densité est indiqué en figure 2.1 c avec une comparaison entre la solution numérique de l'équation (2.49) et l'approximant de Padé.

En trois dimensions, les vortex forment des lignes. Le schéma en figure 2.1e montre une ligne de vortex en bleu entourée d'une zone de faible densité (tube rouge). La circulation de la vitesse le long du cercle bleu entourant le vortex est quantifiée. Les lignes de vortex en trois dimensions permettent des phénomènes n'existant pas avec les points vortex 2D. Par exemple, un anneau de vortécité, ou vortex ring, est obtenu lorsque la ligne de vortex est fermée, comme montré en figure 2.1c. Une autre géométrie intéressante est la reconnection, c'est à dire le croisement de deux lignes de vortex (qui peuvent ensuite s'échanger des branches). Les oscillations des lignes de vortex peuvent prendre la forme d'ondes de Kelvin jouent un rôle important dans la dissipation de l'énergie dans l'hélium superfluide. Ces phénomènes ont été observés expérimentalement (Fonda et al., 2014; Bewley et al., 2008).

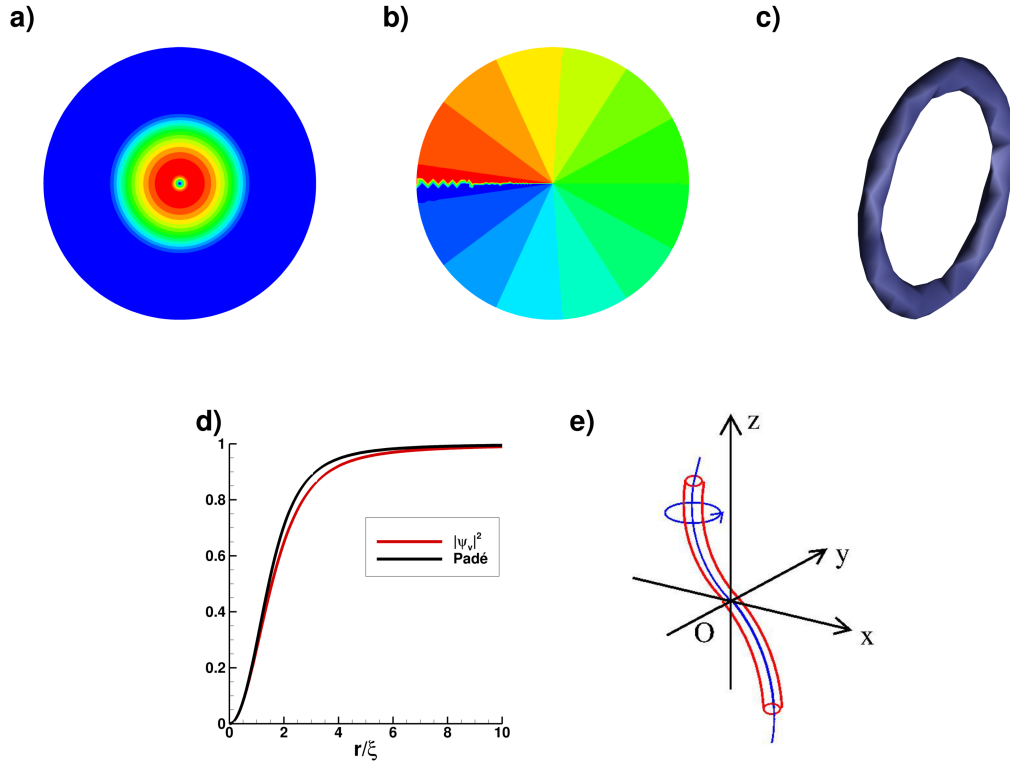


Figure 2.1.: Vortex dans un condensat en deux dimensions: a) densité, b) phase, c) iso-surface de densité autour d'un anneau de vortécité, d) comparaison du profil de densité du vortex (équation (2.49)) et de l'approximant de Padé (2.50), e) schéma d'une ligne de vortex en trois dimensions (suivant Barengghi and Parker (2016)).

2.6. Réduction de dimensions

Le potentiel V_{trap} permet de contrôler la forme du condensat. Considérons le cas où $\omega_x = \omega_y = \omega_{\perp}$. En adaptant les rapports entre les fréquences $\omega_{\perp}$ et ω_z , il est possible de donner au système une forme de cigare ($\omega_{\perp} \gg \omega_z$) ou de crêpe ($\omega_{\perp} \ll \omega_z$). Ces géométries permettent, sous certaines conditions sur les paramètres du condensat, de considérer le système comme uni- ou bidimensionnel.

Ces conditions sont les suivantes:

- Cas $\omega_{\perp} \gg \omega_z$: le condensat peut être considéré unidimensionnel si $\mu \ll \hbar\omega_{\perp}$ (Frantzeskakis, 2010). Cette condition revient à considérer qu'il n'y a pas d'excitations le long des axes confinés x et y , et le système est donc dans l'état fondamental dans ces directions. On va alors faire la décomposition suivante en coordonnées cylindriques (r, θ, z) :

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \phi_{2D}(r)\psi_{1D}(z, t). \quad (2.52)$$

Pour une interaction g faible, on peut prendre ϕ_{2D} comme l'état fondamental de l'oscillateur harmonique quantique:

$$\phi_{2D}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a_{\perp}^{ho}} \exp\left(-\frac{r^2}{2(a_{\perp}^{ho})^2}\right), \quad (2.53)$$

avec $a_{\perp}^{ho} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}}}$. Cet état est normalisé de façon à respecter la contrainte (2.13):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{1D}(z)|^2 dz = N, \quad \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \phi_{2D}^2(r) r d\theta dr = 1. \quad (2.54)$$

En multipliant par ψ_{2D} , en intégrant par rapport à x et y et avec le changement de jauge $\psi_{1D}(z, t) \rightarrow \psi_{1D}(z, t)e^{-\frac{i}{\hbar}\omega_{\perp}t}$ on obtient alors l'équation de Gross-Pitaevskii 1D:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{1D}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{1D} + V_{\text{trap},z} \psi_{1D} + g_{1D} |\psi_{1D}|^2 \psi_{1D}, \quad (2.55)$$

avec:

$$V_{\text{trap},z} = \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2, \quad (2.56)$$

$$g_{1D} = g \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} \phi_{2D}^4(r) r d\theta dr = 2a_s \hbar \omega_{\perp}. \quad (2.57)$$

- Cas $\omega_{\perp} \ll \omega_z$: le système peut être considéré bidimensionnel si $\mu \ll \hbar\omega_z$. De la même manière que précédemment, on peut séparer les variables suivant:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_{2D}(r, t) \phi_{1D}(z), \quad \phi_{1D}(z) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{a_z^{ho}}} \exp\left(-\frac{z^2}{2(a_z^{ho})^2}\right). \quad (2.58)$$

Cela mène à l'équation de Gross-Pitaevskii en deux dimensions:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{2D}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{2D} + V_{\text{trap},r} \psi_{2D} + g_{2D} |\psi_{2D}|^2 \psi_{2D}, \quad (2.59)$$

avec:

$$V_{\text{trap},r} = \frac{1}{2} m \omega_{\perp}^2 r^2, \quad (2.60)$$

$$g_{2D} = g \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{1D}^4 dz = 2\sqrt{2\pi} a_z^{ho} a_s \hbar \omega_z. \quad (2.61)$$

2.7. Adimensionnement

Lorsque l'on résout numériquement l'équation (2.20), il est intéressant de travailler avec des variables adimensionnées. Pour ce faire, il est nécessaire de définir des grandeurs de références x_{ref} et t_{ref} . La fonction d'onde est caractérisée par la densité moyenne n_0 . On fait alors le changement de variable suivant:

$$\tilde{x} = \frac{x}{x_{ref}}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{t_{ref}}, \quad u = \tilde{\psi} = \frac{\psi}{\psi_0}. \quad (2.62)$$

Le potentiel fournit directement les longueurs et temps caractéristiques associés au système, et l'on peut prendre: $x_{ref} = a_{\perp}^{ho}$ et $t_{ref} = \omega_{\perp} = \min(\omega_x, \omega_y)$ la fréquence associée au potentiel de piégeage. ψ_0 est choisi de façon à obtenir une norme unitaire:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\psi}|^2 = 1. \quad (2.63)$$

Pour cela, on pose $\psi_0 = \sqrt{n_0}$ avec $n_0 = N(a^{ho})^{-d}$ et d la dimension d'espace. On obtient alors l'équation adimensionnée:

$$i \frac{\partial u}{\partial \tilde{t}} = -\frac{1}{2} \nabla^2 u + C_{trap} u + C_g |u|^2 u - i C_{\Omega} A^T \nabla u. \quad (2.64)$$

Les différents coefficients sont donnés par:

$$C_{trap} = \frac{1}{2} (a_x \tilde{x}^2 + a_y \tilde{y}^2 + a_z \tilde{z}^2 + a_4 (\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2)^2), \quad (2.65)$$

$$C_g = \frac{gN}{\hbar \omega_{\perp} (a^{ho})^d}, \quad (2.66)$$

$$C_{\Omega} = \frac{\Omega}{\omega_{\perp}}. \quad (2.67)$$

L'expression pour C_g devient:

$$C_g = \begin{cases} \frac{4\pi N a_s}{a_{\perp}^{ho}} & \text{en 3D,} \\ \frac{2\sqrt{2\pi} N a_s a_z^{ho} m \omega_z}{\hbar} & \text{en 2D,} \\ \frac{2N a_s}{a_z^{ho}} & \text{en 1D.} \end{cases} \quad (2.68)$$

et les coefficients du potentiel sont (voir (2.32)):

$$a_x = \left(\frac{\omega_x}{\omega_{\perp}} \right)^2 + 2 \frac{U_2}{m \omega_2^2 \omega_{\perp}^2}, \quad (2.69)$$

$$a_y = \left(\frac{\omega_y}{\omega_{\perp}} \right)^2 + 2 \frac{U_2}{m \omega_2^2 \omega_{\perp}^2}, \quad (2.70)$$

$$a_z = \left(\frac{\omega_z}{\omega_{\perp}} \right)^2, \quad (2.71)$$

$$a_4 = 2 \frac{U_4 (a_{\perp}^{ho})^2}{m \omega_{\perp}^2 \omega_4^4}. \quad (2.72)$$

3. Identification des vortex

Le travail présenté dans ce chapitre a fait l'objet d'un article soumis à la revue *Computer Physics Communications* : Victor Kalt, Georges Sadaka, Ionut Danaila, Frédéric Hecht, **Identification of vortices in quantum fluids: finite element algorithms and programs**.

Obtenir des informations sur les vortex est important pour mieux comprendre les propriétés du système. Cela permet, par exemple, d'étudier la formation de réseaux d'Abrikosov dans les condensats en rotation, ou la densité de ligne de vortex, paramètre important dans la turbulence superfluide.

Plusieurs méthodes ont été proposées pour extraire la position des vortex de simulations numériques. [Villois et al. \(2016\)](#) ont proposé de rechercher les zéros de la fonction d'onde à l'aide d'une méthode de Newton-Raphson. Une interpolation de Fourier est utilisée pour évaluer la fonction d'onde entre les points du maillage. [Liu et al. \(2020\)](#) ont présenté une méthode basée sur des graphes pour une visualisation en temps réel de la turbulence quantique. Une méthode d'optimisation locale nécessitant une interpolation reste cependant nécessaire pour identifier précisément la position du vortex. Ces algorithmes sont très précis mais présentent deux inconvénients: le temps de calcul ou le nombre de processeurs nécessaires sont importants. Une simulation de turbulence quantique de résolution 256^3 présentée par [Villois et al. \(2016\)](#) nécessite ainsi 6 heures de calcul sur 64 coeurs. De plus, l'utilisation de l'interpolation de Fourier est principalement adaptée aux simulations obtenues par une méthode spectrale, et donc avec un maillage régulier. Ce problème de régularité pourrait être résolu en utilisant une approche similaire à celle de [Caliari and Zuccher \(2017\)](#): une transformée de Fourier rapide adaptée à un maillage non-équidistant a été utilisée pour résoudre l'équation de Gross-Pitaevskii par une méthode de splitting sur un maillage irrégulier. Cependant, dans les cas où un grand degré de précision n'est pas nécessaire, une méthode plus simple serait utile.

Nous avons donc développé une toolbox permettant une recherche rapide et sans interpolation de la position du vortex en utilisant directement les propriétés définissant le vortex. Cette toolbox a les avantages suivants:

- La méthode de détection est directement adaptée au cas de maillages non réguliers obtenus, par exemple, pour une simulation réalisée avec des éléments finis, où le maillage peut être raffiné autour des vortex.
- La méthode est locale et sans interpolation ce qui permet de traiter des simulations à haute résolution en les découpant en morceaux plus petits.
- Le code est adapté à l'identification de vortex dans les condensats, ce qui implique la prise en compte de l'extérieur du condensat et de la densité non-uniforme.
- Des caractéristiques, comme le rayon des vortex ou le spectre de Kelvin, sont calculées.
- Le code peut également traiter des images expérimentales.
- Des scripts de conversion, permettant de transformer des données obtenues par des codes Fortran comme GPS vers des solutions et maillages FreeFem++ utilisables par la toolbox, sont fournis.

Dans ce chapitre, la première section 3.1 est dédiée au principe de l'identification des vortex via l'utilisation d'éléments finis. La section 3.2 décrit l'algorithme utilisé pour les simulations 2D. Le fonctionnement de la bibliothèque de minimisation IPOPT est l'objet de la section 3.3. Suivent ensuite en 3.4 et 3.5 une description des algorithmes utilisés pour les simulations 3D et les images expérimentales. Les différents cas tests utilisés pour valider la méthode sont présentés en section 3.6.

3.1. Principe de l'identification

Un vortex est caractérisé par deux propriétés:

- la densité au centre du vortex est nulle: $\rho = 0$,
- l'intégrale de la circulation de la vitesse sur une courbe fermée autour du vortex est quantifiée: $\Gamma = \oint_C \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} = \frac{h}{m}\kappa$.

Il est possible d'identifier la position des vortex dans une donnée complexe u obtenue par simulation numérique en appliquant directement ces deux propriétés. Pour ce faire, représentons la fonction d'onde par des éléments finis P1 (linéaires par morceaux) sur un maillage triangulaire. La première propriété implique que les parties réelles et imaginaires de la fonction d'onde (notées respectivement u_r et u_i) changent de signe sur un triangle si celui-ci contient un zéro. En notant P_0 , P_1 et P_2 les sommets du triangle, on obtient quatre conditions:

$$\min(u_r(P_0), u_r(P_1), u_r(P_2)) < 0, \quad (3.1)$$

$$\min(u_i(P_0), u_i(P_1), u_i(P_2)) < 0, \quad (3.2)$$

$$\max(u_r(P_0), u_r(P_1), u_r(P_2)) > 0, \quad (3.3)$$

$$\max(u_i(P_0), u_i(P_1), u_i(P_2)) > 0. \quad (3.4)$$

Si elles sont respectées, l'emplacement du zéro est donné en coordonnées barycentriques par les coordonnées suivantes:

$$x_v = \frac{\det(u(P_0), 0, u(P_2))}{\det(u(P_0), u(P_1), u(P_2))}, \quad (3.5)$$

$$y_v = \frac{\det(u(P_0), u(P_1), 0)}{\det(u(P_0), u(P_1), u(P_2))}. \quad (3.6)$$

Il reste à vérifier la deuxième propriété. En effet, un zéro de la fonction d'onde peut ne pas être un vortex. L'exemple le plus simple est l'extérieur d'un condensat, où la densité diminue lorsque l'on s'éloigne du condensat. Un zéro de densité peut alors apparaître sans correspondre à un vortex. Pour vérifier la propriété de circulation, l'intégrale dans l'équation (2.45) est discrétisée sur le bord du triangle pour approcher le quantum de circulation:

$$\kappa = \frac{1}{2\pi} \Im \left(\log \left(\frac{u(P_1)}{u(P_0)} \right) + \log \left(\frac{u(P_2)}{u(P_1)} \right) + \log \left(\frac{u(P_0)}{u(P_2)} \right) \right). \quad (3.7)$$

Un quantum de circulation non nul valide la présence d'un vortex de coordonnées (x_v, y_v) .

3.2. Identification des vortex dans une simulation numérique 2D

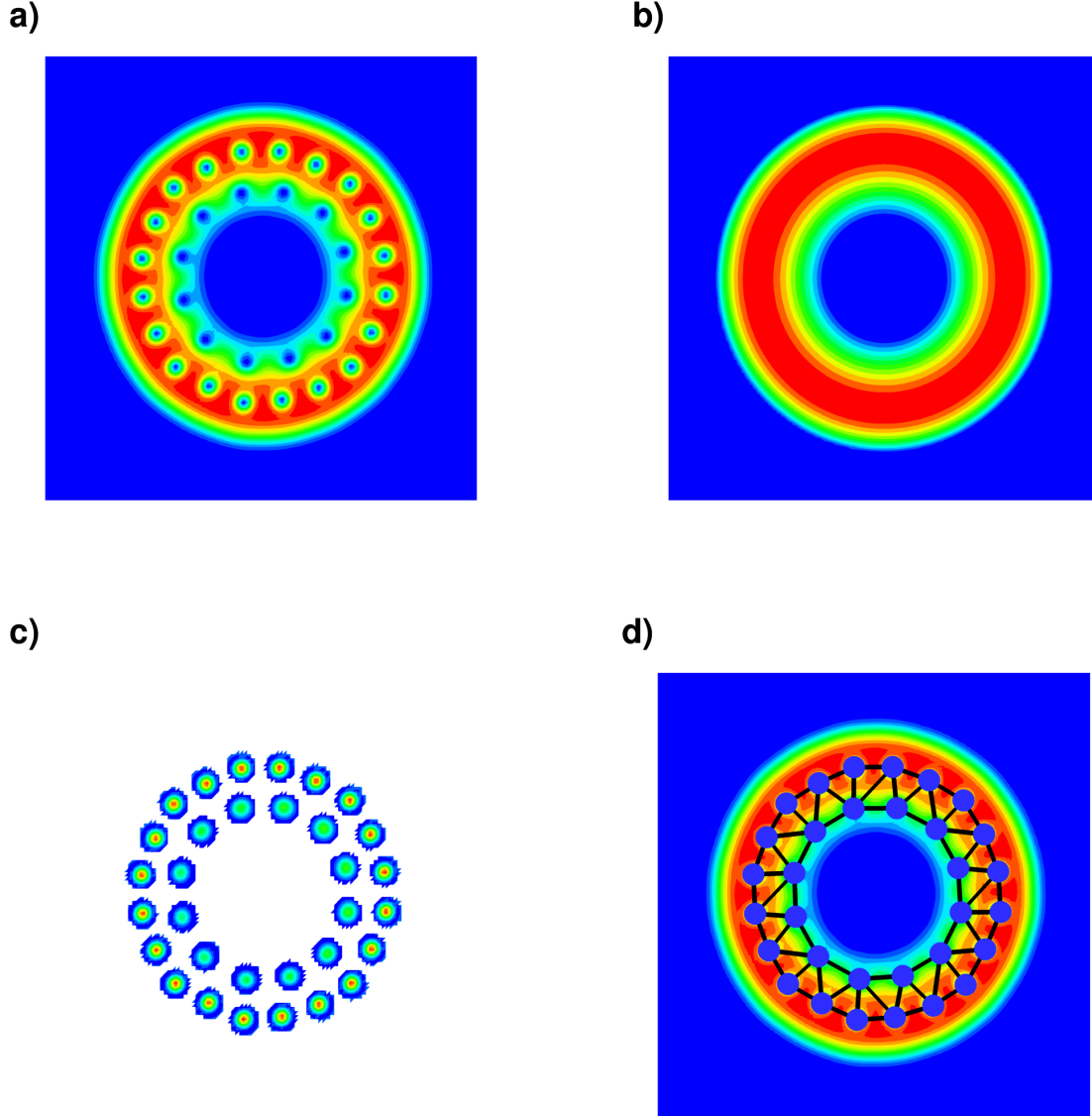


Figure 3.1.: Illustration des étapes de l'identification des vortex en 2D. Données issues d'une simulation numérique d'un condensat en rotation rapide avec un potentiel quartique-quadratique (Vergez et al., 2016). a) Densité initiale ρ , b) densité de Thomas-Fermi ρ_{TF} , c) zones utilisées pour la recherche des points de vortex et le fit avec la Gaussienne, d) maillage des vortex identifiés (points bleus) au-dessus de la donnée initiale.

Pour les simulations numériques 2D, le code calcule la position des vortex, mais également leur rayon (obtenu en approchant la densité avec une gaussienne) et la distance inter-vortex. Un exemple détaillant les différentes étapes de l'algorithme est présenté en figure 3.1. Il s'agit d'un condensat piégé par un potentiel quartique-quadratique. Une difficulté supplémentaire existe dans ce type de cas: la fonction d'onde ne s'annule pas seulement à l'extérieur du condensat mais également au centre, où un vortex géant apparaît. Cette donnée numérique est un cas test présenté par Vergez et al. (2016). La densité initiale est affichée dans la figure 3.1a.

La première étape est la séparation de la zone représentant le condensat du reste de la simulation. Deux situations sont possibles:

- Si les paramètres utilisés pour réaliser la simulation sont connus, il est possible de calculer l'approximation de Thomas-Fermi (voir section 2.3) avec la densité ρ_{TF} , le rayon r_{TF} (ou dans le cas du vortex géant les rayons intérieur et extérieur) et de ne garder que les triangles où $\rho_{TF} > 0$.
- Si les paramètres ne sont pas connus, une isoligne associée à une faible valeur de densité ρ_{min} est utilisée pour délimiter les deux régions. Dans l'exemple présenté, $\rho_{min} = 5 \cdot 10^{-5}$, mais il peut être nécessaire d'ajuster ce paramètre. L'isoligne correspond à une courbe fermée délimitant les deux régions et seuls les triangles à l'intérieur sont gardés. Dans le cas du vortex géant, une deuxième isoligne est obtenue au centre du condensat, et les triangles à l'intérieur de cette deuxième isoligne sont enlevés.

Une fois le condensat isolé, les vortex peuvent être directement obtenus via l'application des équations (3.5) et (3.7) sur chaque élément du maillage. Reste ensuite à calculer des informations et diagnostics associés aux vortex. En 2D, nous cherchons principalement à estimer le rayon du vortex en approchant la densité avec une gaussienne. La première étape est de séparer la densité du vortex ρ_v ($0 \leq \rho_v \leq 1$) de la densité d'arrière-plan ρ_b . On a la décomposition suivante:

$$\rho = \rho_b \rho_v. \quad (3.8)$$

Deux situations existent:

- Si les paramètres de la simulation sont connus, on approxime $\rho_b \approx \rho_{TF}$.
- Sinon, la densité de Thomas-Fermi est obtenue en approchant ses coefficients. La forme est la suivante:

$$\rho_b = \rho_0^{\text{fit}} - \frac{1}{2} \left(a_x^{\text{fit}} x^2 + a_y^{\text{fit}} y^2 + a_4^{\text{fit}} (x^2 + y^2)^2 \right), \quad (3.9)$$

et les paramètres $C = \{\rho_0^{\text{fit}}, a_x^{\text{fit}}, a_y^{\text{fit}}, a_4^{\text{fit}}\}$ sont obtenus en minimisant la fonctionnelle

$$J_{TF}(C) = \frac{1}{2} \|\rho(x, y) - \rho_b(C, x, y)\|_{Th_{\text{trunc}}}^2. \quad (3.10)$$

avec la bibliothèque IPOPT (Wächter and Biegler, 2006) qui utilise une méthode de minimisation par points intérieurs. Cette minimisation est effectuée sur un maillage Th_{trunc} obtenu en retirant les régions correspondant aux vortex. En effet, en comparant le résultat du fit avec des paramètres connus, il est apparu que les fortes variations de densité autour des vortex ne permettent pas de retrouver les coefficients de Thomas-Fermi désirés. Après différents tests, la meilleure méthode obtenue pour définir Th_{trunc} est de retirer des disques de rayon $0.1 d_{\min}$ autour des vortex, avec $d_{\min}$ le minimum de la distance entre les vortex obtenus précédemment.

La densité de Thomas-Fermi dans le cas du vortex géant est affichée en figure 3.1b. On peut désormais approcher la densité du vortex avec une gaussienne de la façon suivante:

$$\rho_b - \rho = \rho_b(1 - \rho_v) = A \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x - x_0)^2}{r_x^2} - \frac{1}{2} \frac{(y - y_0)^2}{r_y^2} \right]. \quad (3.11)$$

Le fit est réalisé sur un disque centré sur le vortex et de rayon $0.45 d_{\min}$. Ces disques sont représentés en figure 3.1c, avec la densité $(\rho_b - \rho)$ utilisée pour le fit. L'amplitude A permet de définir le contraste $A/\rho_b(x_0, y_0)$ correspondant au ratio entre la densité manquante à l'emplacement du vortex et la densité de Thomas-Fermi au même point. Cette approche permet de ne prendre en compte que les vortex suffisamment définis. Ainsi, seuls les vortex ayant un contraste supérieur à 0.3 sont pris en compte lors du calcul des rayons. Ce concept est utilisé pour l'analyse de résultats expérimentaux (Coddington et al., 2004) et numériques (Danaila, 2005).

Le rayon du vortex est obtenu en prenant $r_v = (r_x + r_y)/2$. En pratique, on retrouve bien $r_v \approx r_x \approx r_y$, ce qui est attendu dans le cas d'un potentiel isotrope. Les coordonnées du vortex x_0 et y_0 peuvent aussi être considérées comme des paramètres à approcher avec la gaussienne. Les tests ayant montré que l'on retrouve $x_0 \approx x_v$ et $y_0 \approx y_v$, le calcul a été simplifié en retirant la position du vortex des paramètres à approximer. On prend donc directement $x_0 = x_v$, $y_0 = y_v$. Cela permet une meilleure convergence d'IPOPT sans perte de précision.

Un maillage est construit en prenant les vortex pour sommets. Superposer ce maillage à la densité initiale permet une visualisation directe du réseau de vortex, comme montré sur la figure 3.1d. Dans le cadre d'un réseau d'Abrikosov, le paramètre de maille est calculé pour les vortex intérieurs (c'est à dire avec six voisins). Il correspond à la distance moyenne d'un vortex avec ses voisins.

3.3. Bibliothèque d'optimisation IPOPT

La bibliothèque IPOPT (Wächter, 2002) implémente une méthode de minimisation par point intérieur couplée à une méthode de barrière (Nocedal et al., 2009) et à un filtre de recherche linéaire (Wächter and Biegler, 2005a,b). Son intégration dans FreeFem++ (Auliac, 2014) a permis l'étude de problèmes de contacts entre solides déformables (Houssein et al., 2019) ou d'optimisation de forme (Lance, 2021). Dans le cadre des condensats de Bose-Einstein, elle a été utilisée par Vergez et al. (2016) pour la recherche d'états stationnaires en minimisant l'énergie de Gross-Pitaevskii. Les problèmes d'optimisation étudiés par IPOPT sont de la forme:

$$\text{trouver: } \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} J(\mathbf{x}), \quad (3.12)$$

$$\text{sous les contraintes: } c(\mathbf{x}) = 0, \quad (3.13)$$

$$x_L^{(i)} \leq x^{(i)} \leq x_U^{(i)}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.14)$$

avec J la fonction objectif (de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$), c une fonction de contrainte (de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^m$ avec $m \leq n$) et $\mathbf{x}_L$ et $\mathbf{x}_U$ ($x_L^{(i)} \leq x_U^{(i)}$) définissent les bornes de l'espace de recherche. J et c doivent être deux fois continûment différentiables. Pour utiliser la bibliothèque il est nécessaire de lui donner le jacobien de la fonction objectif (la hessienne peut également être donnée mais ce n'est pas obligatoire, des tests ont montré que cela n'améliore pas les résultats). Pour approcher les coefficients de la densité de Thomas-Fermi, la fonctionnelle est donnée par (3.10) et le jacobien est alors:

$$\nabla J_{TF} = (\rho(x, y) - \rho_b(C, x, y)) \begin{pmatrix} -1 \\ \frac{x^2}{2} \\ \frac{y^2}{2} \\ \frac{(x^2 + y^2)^2}{2} \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Pour estimer le rayon du vortex, la fonctionnelle est:

$$J_v = \frac{1}{2} \left\| \rho_b(x, y) - \rho(x, y) - A^{\text{fit}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(x - x_0)^2}{(r_x^{\text{fit}})^2} - \frac{1}{2} \frac{(y - y_0)^2}{(r_y^{\text{fit}})^2} \right] \right\|_{Th_{\text{trunc}}}^2, \quad (3.16)$$

que l'on peut réécrire:

$$J_v = \frac{1}{2} \left\| \rho_b(x, y) - \rho(x, y) - \underbrace{A^{\text{fit}} \exp \left[-s_x^{\text{fit}}(x - x_0)^2 - s_y^{\text{fit}}(y - y_0)^2 \right]}_{G^{\text{fit}}} \right\|_{Th_{\text{trunc}}}^2, \quad (3.17)$$

avec $s_x^{\text{fit}} = \frac{1}{2(r_x^{\text{fit}})^2}$ et $s_y^{\text{fit}} = \frac{1}{2(r_y^{\text{fit}})^2}$. On a alors les paramètres $C_v = \{A^{\text{fit}}, s_x^{\text{fit}}, s_y^{\text{fit}}\}$. Le jacobien associé à ces paramètres est:

$$\nabla J_v(C_v) = (\rho_b(x, y) - \rho(x, y) - A^{\text{fit}} G^{\text{fit}}) G^{\text{fit}} \begin{pmatrix} -1 \\ (x - x_0)^2 \\ (y - y_0)^2 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Dans les deux cas présentés ci-dessus, il n'y a pas de fonction de contrainte. Aucune limite $\mathbf{x}_L$, $\mathbf{x}_U$ n'est utilisée lors du fit de la densité de Thomas-Fermi. Pour le calcul des coefficients de la gaussienne (3.11), il est nécessaire de limiter l'espace possible en imposant que le rayon du vortex soit inférieur au rayon du domaine sur lequel le fit est réalisé, et que l'amplitude A^{fit} soit proche du maximum de $(\rho_b - \rho)$ sur Th_{trunc} .

3.4. Identification des vortex dans une simulation numérique 3D

L'algorithme utilisé dans la toolbox en 3D combine l'identification des vortex présentée en section 3.1 avec la méthode de graphe présentée par Liu et al. (2020) pour la construction des lignes de vortex. La fonction d'onde est de nouveau représentée par des éléments finis P1, mais les éléments du maillage sont désormais des tétraèdres. Les vortex sont représentés comme une suite de points situés à l'intersection de la ligne de vortex avec les faces des tétraèdres. En passant de vortex ponctuels (2D) à des lignes, de nouvelles possibilités apparaissent, notamment la possibilité de courbes fermées (vortex ring) et d'intersection de vortex (reconnections). L'algorithme est illustré par une donnée initiale de vortex ring dans l'hélium superfluide (figure 3.2). La méthode la plus simple pour visualiser les vortex en 3D est de calculer une isosurface de faible densité ρ . Cela permet d'obtenir une idée de la forme des vortex, mais ne donne pas accès à leur emplacement exact. Un exemple d'isosurface est représenté en figure 3.2a.

Comme précédemment, il est nécessaire de retirer le domaine extérieur dans le cas des condensats, en calculant la densité de Thomas-Fermi et en ne gardant que les tétraèdres où $\rho_{TF} > 0$. Cela nécessite la connaissance des paramètres nécessaires au calcul de ρ_{TF} . L'algorithme présenté en section 3.1 est alors appliqué sur les faces des tétraèdres pour obtenir les points d'intersections entre les faces et les lignes de vortex. Les éléments de maillage traversés par un vortex sont représentés en figure 3.2. En reliant les points appartenant à un même tétraèdre, et comme les faces sont partagées entre les éléments de maillage (sauf sur le bord), il est possible d'utiliser la géométrie du maillage pour créer un graphe d'une façon similaire à celle présentée par Liu et al. (2020). La connectivité c du graphe permet la séparation des vortex: les points où $c = 1$ sont les extrémités des lignes, $c > 2$ correspond à un point de reconnection entre plusieurs lignes et $c = 2$ est un point à l'intérieur d'une ligne de vortex. La méthode de séparation des vortex est la suivante:

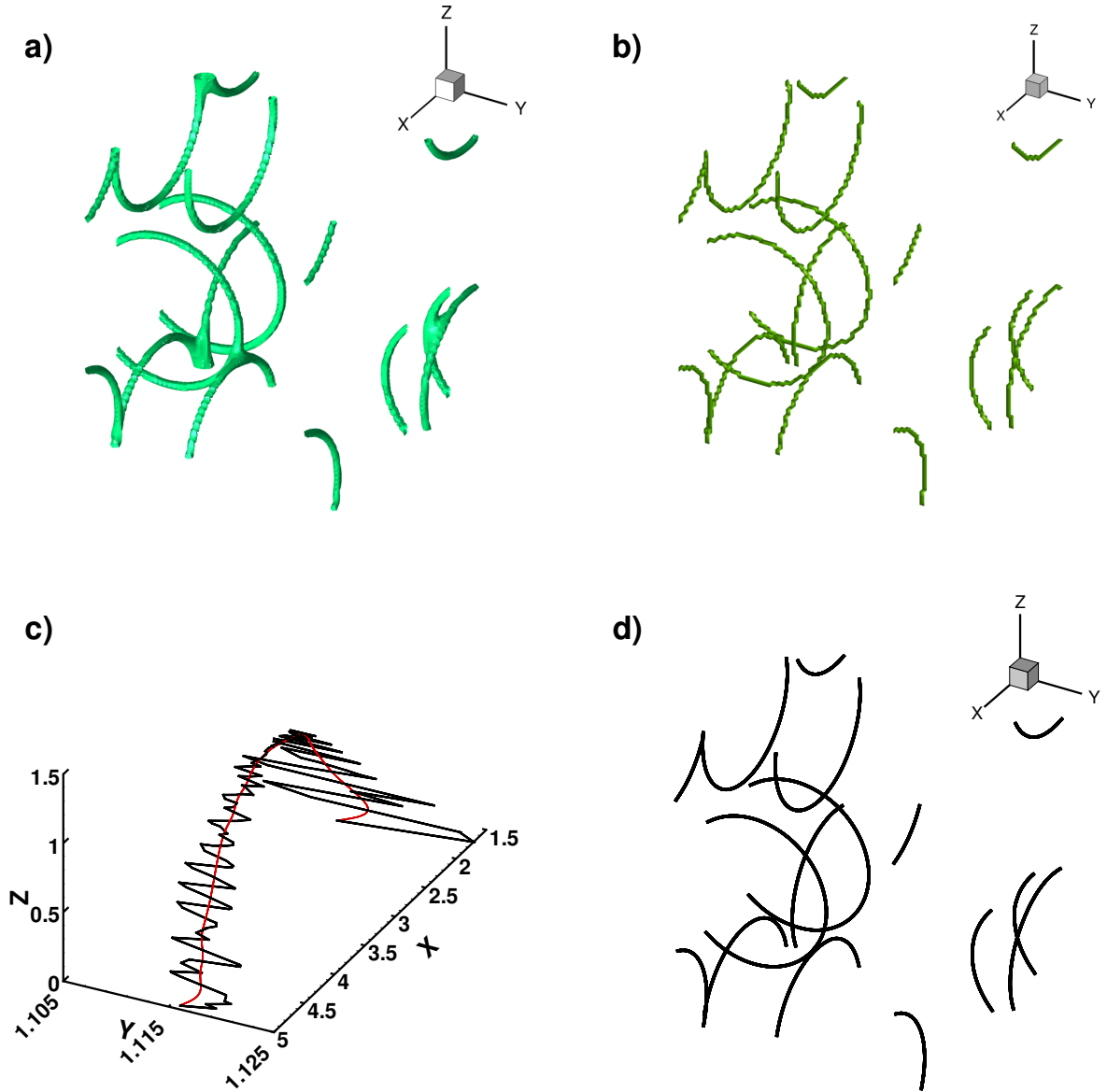


Figure 3.2.: Illustration des étapes de l'identification des vortex en 3D. Cas test de vortex rings dans l'hélium superfluide (Kobayashi et al., 2021). a) Isosurface de faible densité ρ , b) tétraèdres traversés par les lignes de vortex, c) exemple de ligne extraite (noir) et lissée (rouge), d) lignes de vortex identifiées dans le domaine complet.

- On commence par un point de connectivité 1, et l'on suit le graphe jusqu'à atteindre un autre point de connectivité $c \neq 1$ en gardant une liste des points parcourus. Ces points sont enregistrés comme ligne de vortex et on note pour chaque sommet du graphe le nombre d'arêtes parcourues à partir de ce sommet. On répète le processus jusqu'à ce que tous les points de connectivité 1 aient été parcourus.
- La deuxième étape est le traitement des reconnections. On recommence le même processus jusqu'à ce que toutes les arêtes arrivant aux points de reconnections aient été parcourues.

- Il ne reste alors que les boucles. Dans ce cas, on sélectionne un point avec $c = 2$ et suit le graphe jusqu'à retrouver ce point de départ, et on recommence tant qu'il reste des arêtes non parcourues.

Les lignes obtenues ne sont pas lisses, et une étape de lissage est nécessaire. Pour une étude précise de la ligne, une méthode de minimisation locale pour améliorer la position du point de vortex est nécessaire. [Villois et al. \(2016\)](#) ont utilisé une méthode de Newton-Raphson et [Liu et al. \(2020\)](#) une descente de gradient avec une méthode de pseudo-vorticité. Cependant, ces techniques sont lourdes en temps de calcul car elles nécessitent une interpolation de la fonction d'onde. L'interpolation de Fourier est utilisée par [Villois et al. \(2016\)](#), mais elle dépend directement de la représentation spectrale de la fonction, qui n'est pas toujours directement accessible. Nous avons proposé une solution pour lisser la ligne plus rapide, mais moins précise, en appliquant une moyenne glissante sur cinq points. Un exemple est montré en figure 3.2c, avec la ligne extraite du graphe en noir, et la ligne lissée en rouge. L'axe y est agrandi pour mieux voir les oscillations du vortex. Pour une ligne l avec des points l_i , $1 \leq i \leq n$, les nouveaux points m_i sont obtenus par la formule suivante:

$$m_i = \frac{0.8}{5} (l_{i-2} + l_{i-1} + l_i + l_{i+1} + l_{i+2}) + 0.2l_i. \quad (3.19)$$

Les extrémités des vortex sont gardées fixes, et une moyenne à trois points est utilisée pour les second et avant-dernier point. Ce processus peut être répété, avec le nombre d'itérations comme paramètre à ajuster. En pratique, une dizaine d'itérations sont suffisantes, mais ce nombre dépend de la résolution du maillage à travers le nombre de points obtenus le long du vortex. Pour augmenter ce nombre de points, il est possible d'interpoler linéairement les segments de la ligne avant le lissage, ce qui permet d'obtenir une ligne plus lisse. Un inconvénient de cette méthode est qu'elle réduit les boucles fermées, cependant l'effet est faible tant que le nombre d'itérations n'est pas trop élevé. Les lignes obtenues dans le cas test sont affichées en figure 3.2d. Deux quantités pouvant être calculées à partir de la ligne: sa courbure et son spectre de Kelvin. Des exemples sont présentés dans la section 3.6.

3.5. Identification des vortex dans les images expérimentales

La toolbox permet également l'analyse d'images expérimentales de condensats de Bose-Einstein. Ces images sont obtenues en retirant le potentiel de piégeage magnétique et en mesurant l'absorption d'un laser le long de l'axe vertical. On visualise ainsi la densité atomique intégrée le long de l'axe z . Les vortex apparaissent sur l'image expérimentale comme des tâches sombres (de faible densité) que l'on peut voir en figure 1.1. Deux inconvénients peuvent apparaître dans ces manipulations: en relâchant le gaz, celui-ci va se déformer légèrement et des oscillations du réseau de vortex peuvent apparaître. De plus, le fait de mesurer une grandeur intégrée le long d'un axe fait que la courbure des vortex va donner une densité non nulle au centre du vortex. Cet effet est particulièrement important sur les bords où la faible densité diminue fortement le contraste entre les zones de vortex et le condensat. Dans le cas des images, la seule grandeur disponible est donc la densité, et l'utilisation des méthodes de la section 3.1 n'est plus possible car elles nécessiteraient la connaissance de la phase de la fonction d'onde. Nous avons adapté les techniques de la section 3.2 pour ne travailler qu'avec la densité. En particulier, il est impossible en l'absence de la phase de calculer le quantum de circulation. Nous détectons ici des minimums locaux de la densité, sans pouvoir vérifier la deuxième propriété des vortex.

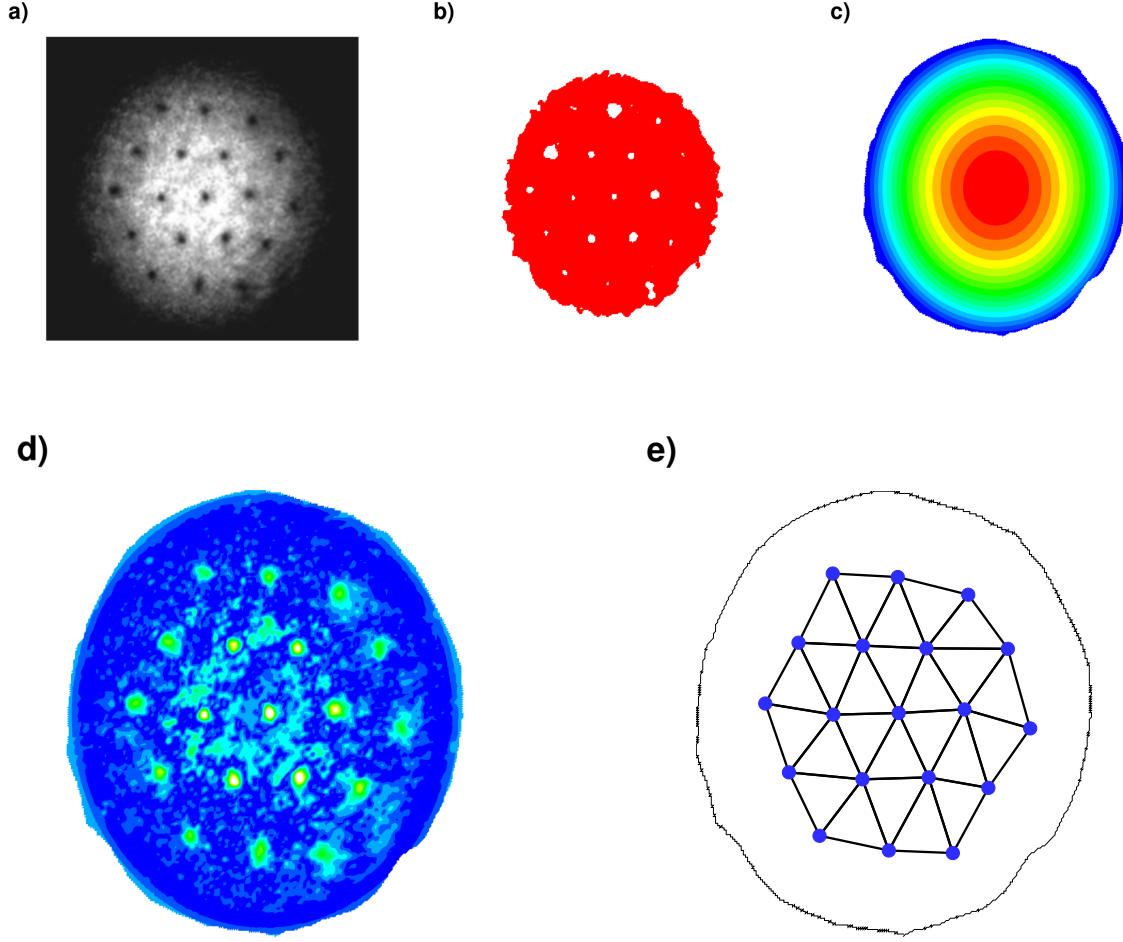


Figure 3.3.: Illustration des étapes de l'identification des vortex dans les images expérimentales. Cas d'un réseau de vortex dans un condensat en rotation lente présenté par [Coddington et al. \(2004\)](#). a) Image expérimentale de la densité atomique ρ , b) régions séparées par le contour de densité ρ_{iso} : condensat en rouge, vortex et extérieur en blanc, c) densité de Thomas-Fermi ρ_{TF} fittée, d) densité des vortex ρ_v , e) maillage des vortex (points bleus) et contour du condensat.

Le fonctionnement de la toolbox est illustré en figure 3.3 par une image expérimentale issue de [Coddington et al. \(2004\)](#) correspondant à un condensat en rotation lente dans un piège harmonique. L'image de départ est affichée en figure 3.3a. Pour l'utiliser, il est nécessaire de la transformer au format `pgm` avant de la lire avec `FreeFem++`. On obtient un tableau de valeurs de gris allant de 0 (noir) à 1 (blanc). Un maillage triangulaire est construit à partir de la grille rectangulaire de pixels, et les valeurs de la densité dans le tableau forment une fonction éléments finis P1 sur ce maillage.

La première étape consiste à séparer les vortex du condensat et l'extérieur. Pour ce faire, nous définissons une nouvelle variable $\rho_{iso} = \mathbb{1}_{\rho > c_{iso}} - \mathbb{1}_{\rho \leq c_{iso}}$ avec c_{iso} un paramètre à ajuster et $\mathbb{1}$ la fonction indicatrice. Si nécessaire, ρ_{iso} peut être lissée grâce à un algorithme de traitement d'image pour retirer le bruit le long de la bordure entre les différentes régions. Nous avons choisi une méthode qui équilibre entre le lissage du contour et la préservation de sa longueur. La figure

3.3b montre que ρ_{iso} permet bien la séparation de l'image en différents sous-domaines associés aux vortex, au condensat et à l'extérieur. Pour détecter l'ensemble des vortex, il peut-être nécessaire d'ajuster c_{iso} avant de recommencer le processus.

Pour chaque région de vortex, les coordonnées du minimum de densité sont utilisées en tant qu'estimation de la position (x_v, y_v) du vortex. A partir de là, toutes les informations nécessaires à l'utilisation de la deuxième partie des algorithmes décrits en section 3.2 sont disponibles:

- un maillage Th_{trunc} est crée en construisant des disques de rayon $0.1d_{min}$ autour des points de vortex, avec d_{min} la distance minimale entre les vortex,
- la densité d'arrière-plan ρ_b est estimée grâce au fit décrit par les équations (3.9) et (3.10),
- la densité des vortex est fittée par la gaussienne (3.11) pour estimer le rayon. Afin d'obtenir une meilleure estimation de la position du vortex, les coordonnées x_0 et y_0 sont également des paramètres du fit (ce n'était pas le cas pour les simulations 2D).

On retrouve en figure 3.3c la densité de Thomas-Fermi estimée, en 3.3d la densité des vortex ρ_v et en 3.3e le maillage des vortex obtenus dans l'image. Puisque l'information sur la dimension du condensat n'est pas connue, toutes les quantités sont indiquées en pixels.

3.6. Validation des algorithmes et résultats

Plusieurs cas test ont été utilisés pour valider le fonctionnement du code et des méthodes numériques et estimer leur précision. Ils sont inclus dans la toolbox afin de permettre aux utilisateurs de tester son fonctionnement en recréant les images présentées dans ce chapitre. Le tableau 3.1 présente le temps de calcul et le nombre d'éléments de maillage pour ces différents cas test. En 3D, les données ont été tronquées en retirant les tétraèdres où $\rho > \rho_{lim}$ avec ρ_{lim} une densité adaptée pour réduire la taille des fichiers et permettre leur partage. Ce n'est pas le cas pour la turbulence quantique avec une résolution de 256^3 . Le premier cas test de chaque catégorie est l'exemple présenté précédemment lors de la description des algorithmes. Une description de la toolbox et des différents paramètres du code est présentée en annexe A.

	Cas test	Figure	temps CPU (s)	Nombre de triangles
Données 2D	Potentiel quartique - quadratique	3.1	2.5 (14.7)	32258
	Réseau d'Abrikosov dense	3.4	22.6 (79.6)	130050
Données 3D	Vortex rings	3.2	0.29	16574 (4368)
	Condensat de Bose-Einstein	3.5	1.4	267963 (84562)
	Vortex knot	3.6	0.5	95004 (3479)
	Onde de Kelvin en k^{-3}	3.7	1.08	273733 (912)
	Onde de Kelvin en k^{-6}	3.7	1.09	273673 (834)
	Turbulence quantique 128^3	3.8	3.9	101189 (37756)
	Turbulence quantique 256^3	3.8	774.7	99488250 (345541)
Images expérimentales	Petit réseau d'Abrikosov	3.3	13.82	91574
	Réseau d'Abrikosov dense	3.9	27.66	114720

Table 3.1.: Temps (CPU) de calcul et nombre d'éléments de maillage pour les différents cas tests. Pour les données 2D, le temps de calcul indiqué correspond au calcul de ρ_b avec les paramètres connus. Le nombre entre parenthèses est le temps de calcul en utilisant le fit pour l'estimation de ρ_b . En 3D, le nombre de tétraèdres traversés par des lignes de vortex est indiqué entre parenthèses.

3.6.1. Réseau d'Abrikosov 2D dense

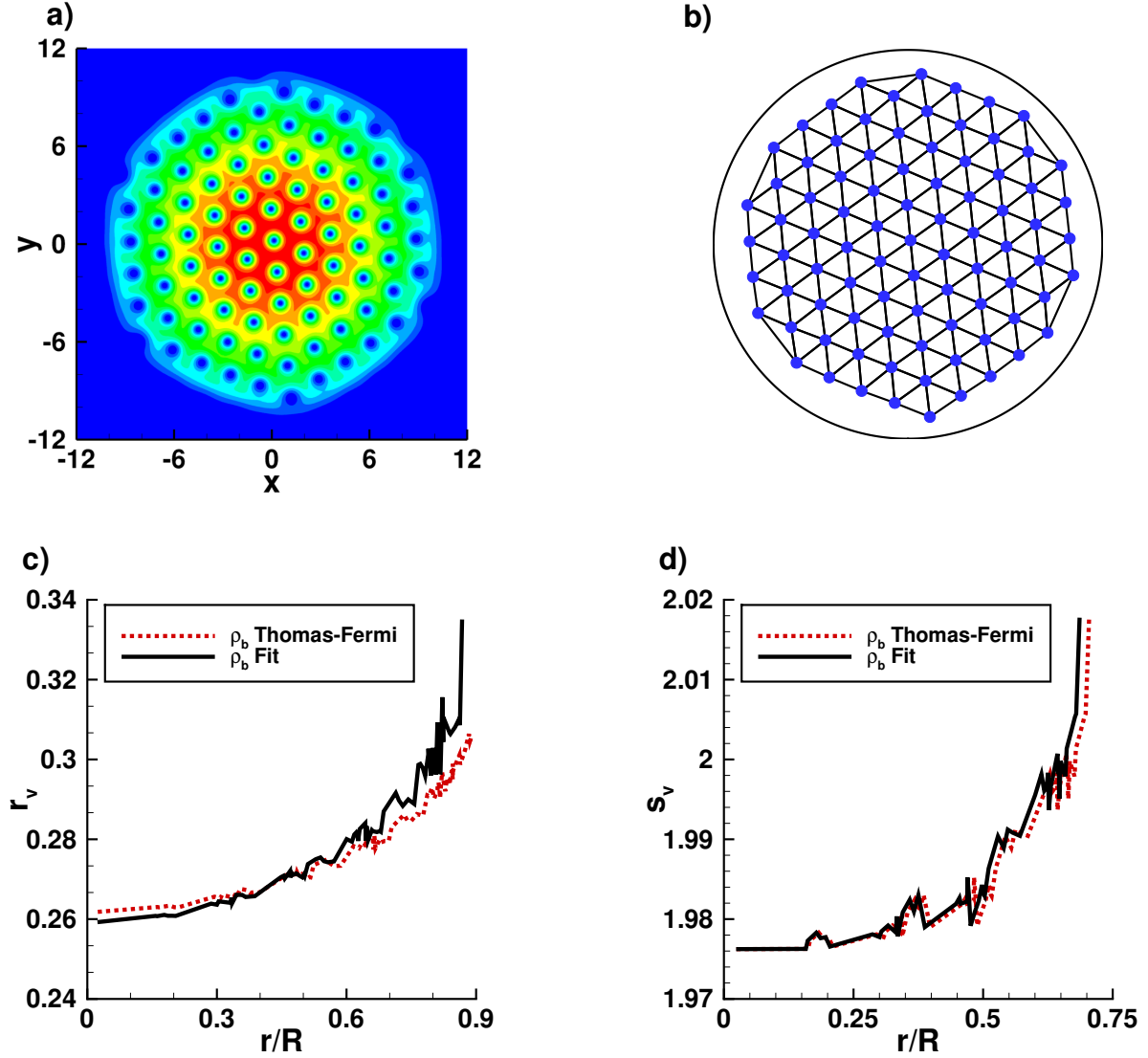


Figure 3.4.: Identification des vortex en 2D pour un réseau d'Abrikosov dense: fonction d'onde obtenue par un code spectral (Parnaudeau et al., 2015). a) Densité initiale ρ , b) maillage des vortex identifiés, c) rayon du vortex r_v en fonction de la distance normalisée au centre du condensat r/R_{TF} , d) distance inter-vortex (paramètre de maille) s_v .

Ce cas test correspond à un réseau d'Abrikosov dans un condensat en rotation rapide obtenu en utilisant un code spectral (Parnaudeau et al., 2015). La densité de Thomas-Fermi est directement calculée à partir des paramètres $C_g = 1000$, $C_\Omega = 0.95$, $a_x = a_y = 1$. La donnée initiale est présentée en figure 3.4a et les vortex identifiés sont affichés en 3.4b. Les caractéristiques du réseau sont affichées ensuite: le rayon des vortex en fonction de la distance au centre du condensat r/R_{TF} en figure 3.4c et le paramètre de maille s_v en 3.4d. On obtient bien des allures similaires pour les deux méthodes de calcul de ρ_b , et les paramètres évoluent de la façon attendue. Le rayon r_v doit ainsi augmenter en s'éloignant du centre du condensat comme décrit par Danaila (2005) de façon à avoir $\frac{r_v}{\xi}$ fixe, avec ξ la longueur de cicatrization.

3.6.2. Condensat de Bose-Einstein 3D

Afin de tester le code sur un maillage non structuré, nous avons simulé un condensat avec le code éléments finis GPFEM (Vergez et al., 2016). Les paramètres de la simulation sont connus et permettent le calcul de ρ_{TF} pour retirer l'extérieur du condensat. Une coupe de la solution initiale est affichée en figure 3.5a, et les 12 lignes de vortex identifiées sont présentées en figure 3.5b.

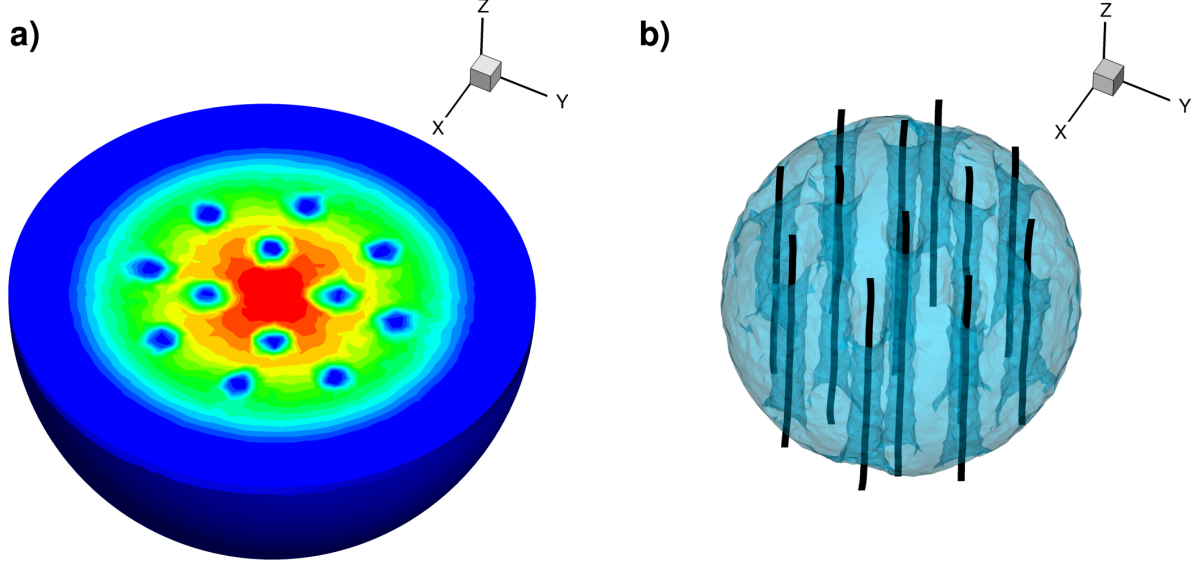


Figure 3.5.: Identification des lignes de vortex en 3D pour un condensat en rotation. Donnée obtenue par un solveur éléments finis (Vergez et al., 2016) sur un maillage non structuré. a) Coupe de la densité initiale ρ , b) lignes de vortex identifiées.

3.6.3. Vortex en noeud (vortex knot)

Pour étudier de façon quantitative les performances de la méthode 3D, il est intéressant de tester le code sur une ligne de vortex connue analytiquement. Un tel cas test est donné par Villois et al. (2016) pour le cas d'un vortex en noeud (vortex knot). La ligne de vortex est définie par $s(\sigma) = (x_p^{-1}(s_x(\sigma)), y_p^{-1}(s_y(\sigma)), z_p^{-1}(s_z(\sigma)))$ avec:

$$s_x(\sigma) = [R_0 + R_1 \cos(q\sigma)] \cos(p\sigma), \quad (3.20)$$

$$s_y(\sigma) = [R_0 + R_1 \cos(q\sigma)] \sin(p\sigma), \quad (3.21)$$

$$s_z(\sigma) = R_1 \sin(q\sigma). \quad (3.22)$$

Les fonctions x_p , y_p and z_p sont introduites pour garantir la périodicité de la fonction d'onde, nécessaire pour l'utilisation de la méthode spectrale dans l'article de Villois et al. (2016):

$$x_p = \frac{-L}{\pi} \cos\left(\frac{\pi}{L}x\right), \quad (3.23)$$

$$y_p = \frac{-L}{\pi} \cos\left(\frac{\pi}{L}y\right), \quad (3.24)$$

$$z_p = \frac{-L}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{L}z\right). \quad (3.25)$$

La figure 3.6a présente la ligne identifiée et le maillage des tétraèdres traversés par le vortex. On voit que le lissage réduit légèrement le rayon de la courbe fermée, mais cet effet est faible. L'intérêt de cet exemple est la comparaison entre les résultats numériques et analytiques. Pour ce faire, la courbure γ de la ligne est comparée en figure 3.6b. On observe que le résultat numérique est une bonne approximation de la courbure réelle du vortex. Les paramètres de cette simulation sont $R_0 = 8\xi$, $R_1 = \frac{\xi}{2}$, $p = 2$ et $q = 5$ avec $\xi = 0.5\Delta x$. La résolution est de 128^3 . Pour reproduire la précision obtenue par la méthode de [Villois et al. \(2016\)](#), une meilleure méthode de lissage et une résolution plus élevée seraient nécessaires, le dernier point ayant l'inconvénient de fortement augmenter le temps de calcul.

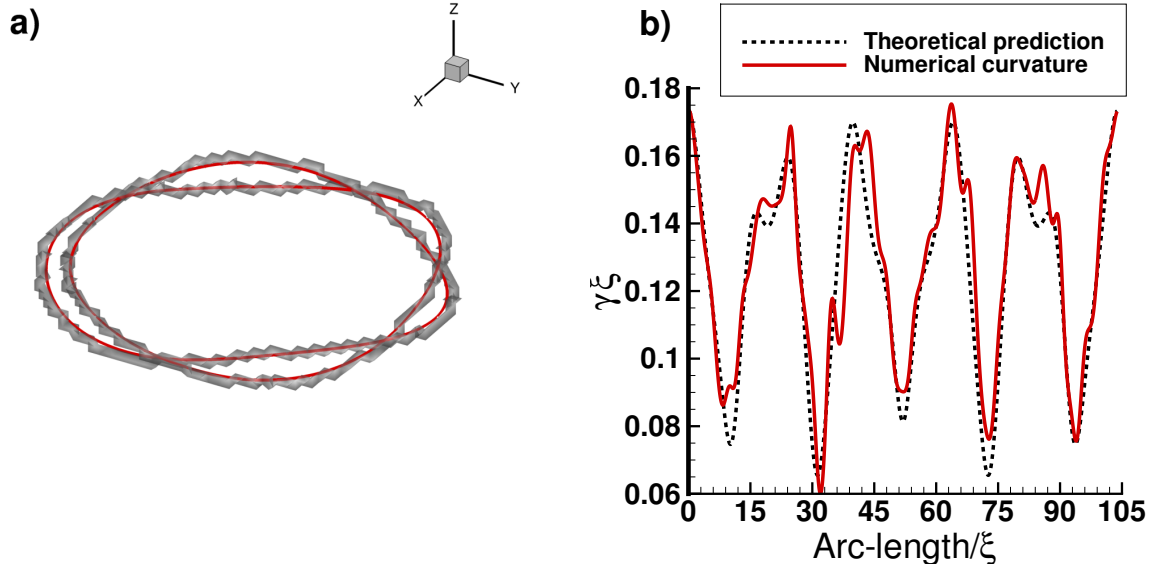


Figure 3.6.: Identification des lignes de vortex en 3D pour un vortex en noeud. Cas test proposé par [Villois et al. \(2016\)](#). a) Ligne de vortex (en rouge) à l'intérieur du maillage des éléments de circulation 1, b) comparaison de la courbure de la ligne avec les valeurs analytiques.

3.6.4. Ondes de Kelvin

Une autre validation permettant la comparaison avec des résultats analytiques est l'étude d'ondes de Kelvin (oscillations de la ligne de vortex). Pour ce faire, des vortex perturbés par des ondes de spectres en k^{-3} et k^{-6} ont été générés en suivant la méthode proposée par [Proment et al. \(2013\)](#). Le profil de vortex dans chaque plan xy est donné par un approximant de Padé ([Berloff, 2004](#)). Le centre du vortex est placé le long d'une ligne $(X(z), Y(z), z)$ définie par:

$$X(z) + iY(z) = \mathcal{F}^{-1} \left(\sqrt{n_{th}(k)} e^{i\phi(k)} \right). \quad (3.26)$$

$n_{th}(k)$ est le spectre imposé à l'onde et $\phi(k)$ est une variable aléatoire distribuée uniformément dans $[0, 2\pi[$. $\mathcal{F}^{-1}$ représente la transformée de Fourier inverse. Pour calculer le spectre de la ligne identifiée, la première étape est de la remailler sur l'intervalle $[0, L_z]$ avec L_z la taille de la boîte de simulation. On peut alors exprimer la ligne comme $L(z) = (l_x(z), l_y(z), z)$ et en notant $r(z) = l_x(z) + il_y(z)$ et $\hat{R}$ la transformée de Fourier de r , on a le spectre:

$$n_{kw} = |\hat{R}(k)|^2. \quad (3.27)$$

Les résultats, présentés en figure 3.7, montrent que l'on retrouve bien le spectre attendu.

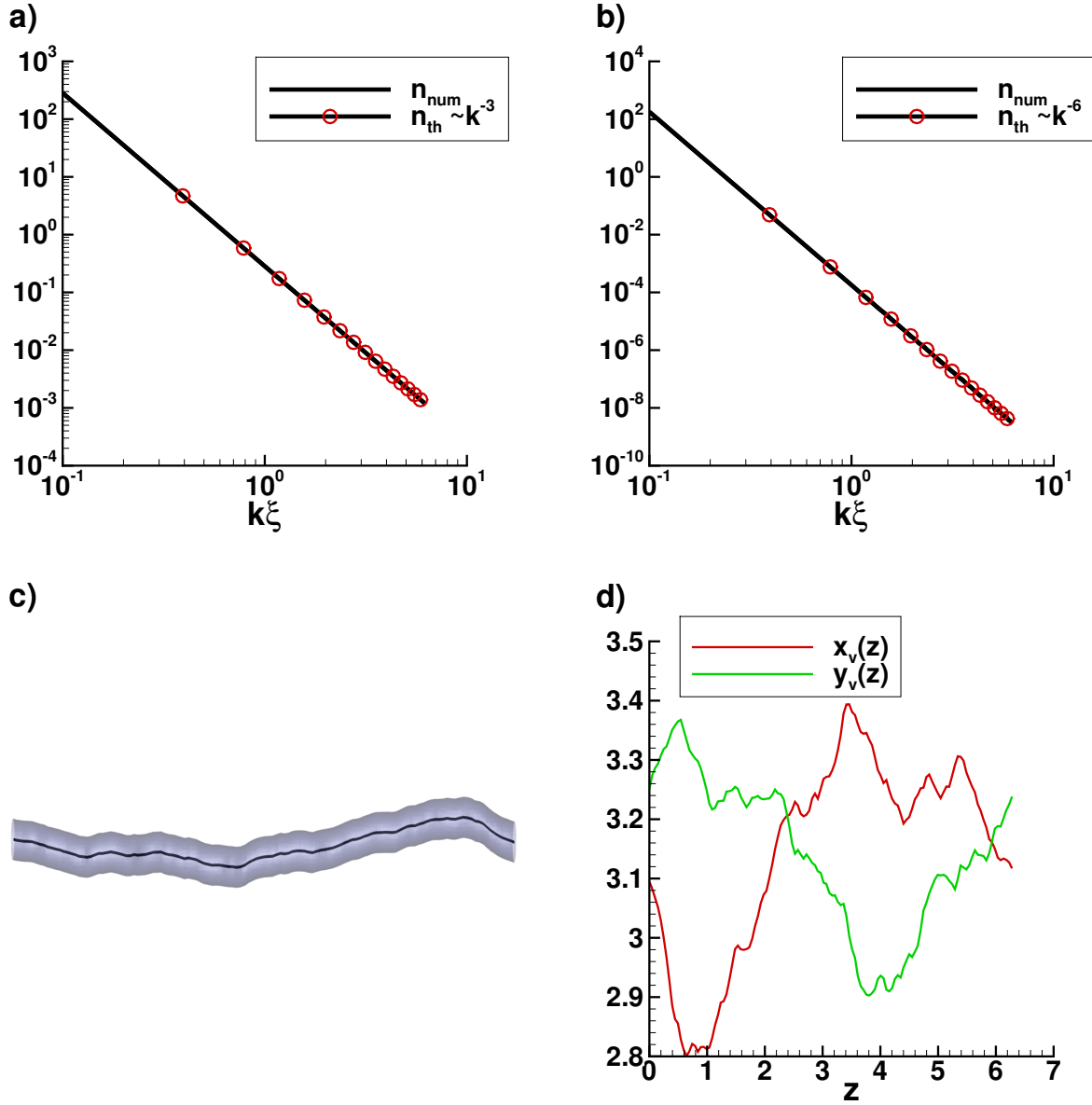


Figure 3.7.: Spectre de Kelvin pour une ligne de vortex avec a) un spectre en k^{-3} et b) un spectre en k^{-6} . Cas test suggéré par [Proment et al. \(2013\)](#), les spectres théoriques sont en rouge et les résultats numériques en noir. c) Ligne de vortex et isosurface de densité pour le cas en k^{-3} , d) coordonnées du vortex $x_v(z)$ et $y_v(z)$ pour le même cas.

3.6.5. Turbulence quantique en 3D

Après avoir évalué la précision de la méthode d'identification des vortex, il reste à s'intéresser au temps de calcul. Pour ce faire, des simulations de turbulence quantique avec un grand nombre de vortex ont été réalisées avec le code spectral GPS ([Parnaudeau et al., 2015](#)). Il s'agit de la solution initiale Taylor-Green présentée par [Kobayashi et al. \(2021\)](#). Deux simulations, de résolutions 128^3 et 256^3 ont été réalisées. Elles contiennent respectivement 155 et 640 lignes de vortex, les vortex ring les plus petits ayant un rayon de l'ordre de la résolution. Les temps de calcul présentés dans le tableau 3.1 sont très satisfaisants: malgré le nombre important de

tétraèdres, le processus d'identification reste très rapide. [Villois et al. \(2016\)](#) rapporte pour le même cas test une durée de 6 heures sur 64 coeurs MPI. Traiter des simulations de résolution plus élevée n'est pas nécessaire: la méthode étant locale, il suffit de découper la boîte de simulation en plusieurs morceaux et de rassembler les lignes identifiées dans chaque sous-domaine avant le lissage. La figure 3.8 présente les lignes de vortex identifiées dans les deux simulations.

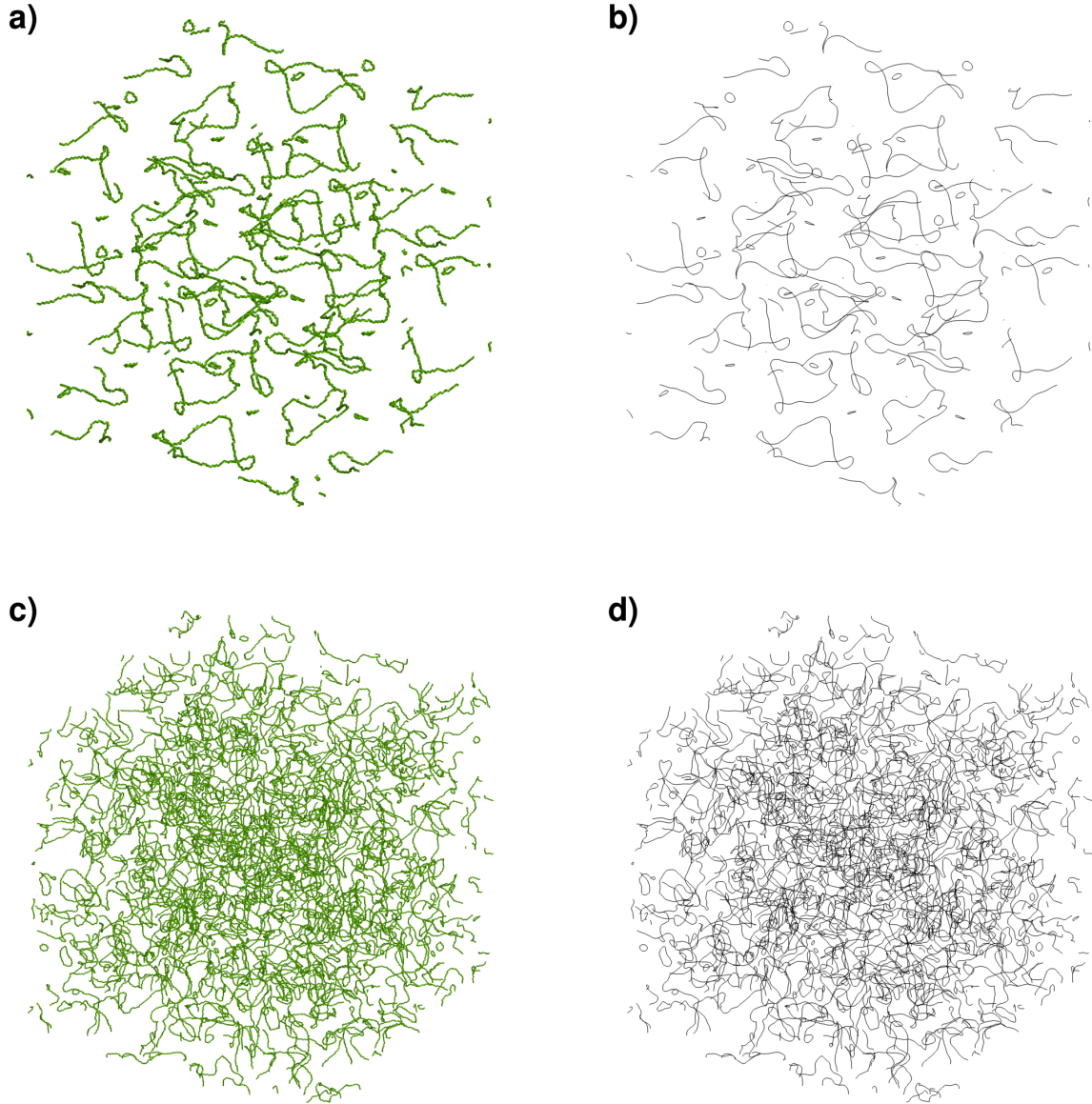


Figure 3.8.: Identification des vortex pour un cas de turbulence quantique dans l'hélium superfluide. Résolution par méthode spectrale de l'équation de Gross-Pitaevskii ([Kobayashi et al., 2021](#)). Tétraèdres traversés par les vortex à gauche et lignes identifiées à droite pour les deux résolutions: 128^3 (a,b) et 256^3 (c,d).

3.6.6. Réseau d'Abrikosov dans une image expérimentale

Ce dernier cas test a pour but de valider le fonctionnement du code associé aux images dans une situation proche de la simulation présentée en section 3.6.1. L'image est issue d'expériences réalisées par [Coddington et al. \(2004\)](#) et est présentée en figure 3.9a. On observe en 3.9b la zone détectée pour le condensat et en 3.9c le maillage des vortex identifiés. Si le contraste est suffisant, le vortex est fitté par la gaussienne et dans ce cas un point bleu est ajouté sur le maillage. Les vortex sur le bord du condensat ne sont pas détectés à cause d'un faible contraste. On remarque en figure 3.9d que l'on retrouve bien l'évolution attendue pour le rayon du vortex r_v : il augmente lorsque l'on s'éloigne du centre.

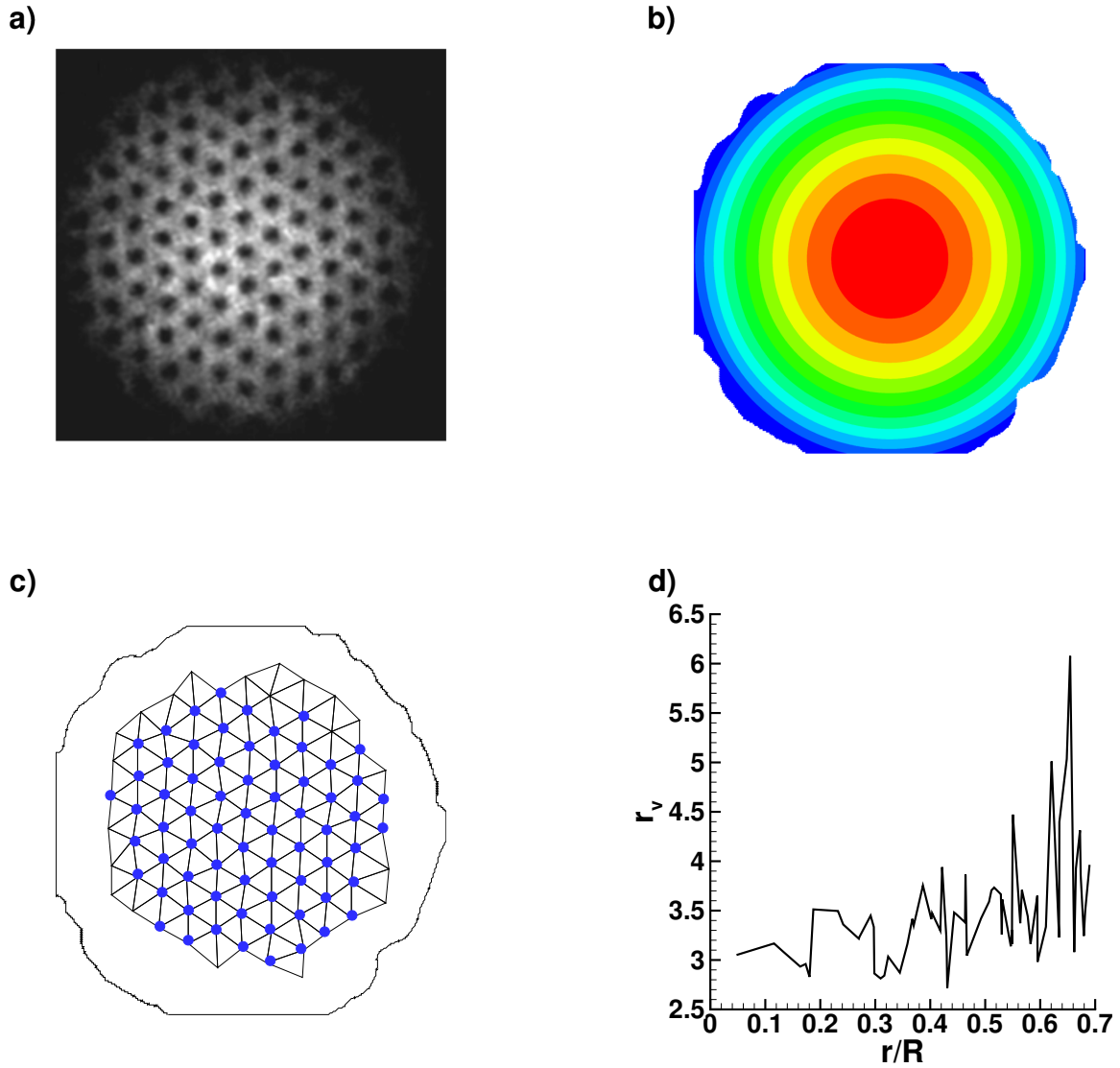


Figure 3.9.: Identification des vortex dans une image expérimentale d'un réseau d'Abrikosov dense ([Coddington et al., 2004](#)). a) Image initiale, b) densité d'arrière-plan ρ_b , c) maillage des vortex identifiés et bordure de Thomas-Fermi, d) rayon des vortex r_v en fonction de la distance au centre du condensat. Dans la figure c), les points bleus symbolisent les vortex ayant un contraste suffisant pour le fit avec la gaussienne.

4. Résolution numérique de l'équation de Bogoliubov-De Gennes

Le travail présenté dans ce chapitre a fait l'objet d'un article soumis à la revue *Computer Physics Communications* : Victor Kalt, Georges Sadaka, Frédéric Hecht, Ionut Danaila, *A finite element toolbox for the Bogoliubov-de Gennes stability analysis of Bose-Einstein condensates*.

Les condensats de Bose-Einstein sont des systèmes très intéressants pour l'étude des excitations et ondes non-linéaires. En plus des vortex droits (en forme de I) présentés dans la section 3.6.2, on peut trouver des solitons, des vortex en forme de S ou de U, des vortex rings, etc. Il est possible de construire des états combinant ces excitations pour étudier leurs interactions. Par exemple, un hopfion est un état comprenant un vortex en I entouré par un vortex ring. Une question importante est celle de la stabilité de ces structures. Pour y répondre, il faut s'intéresser à l'équation de Bogoliubov-de Gennes (BdG) qui est un problème aux valeurs propres pour l'étude de la stabilité linéaire autour d'un état stationnaire. Une résolution numérique du système BdG est souvent nécessaire car peu de résultats analytiques existent. De nombreux articles ont été dédiés à l'étude du modèle BdG, qu'il s'agisse de structures en trois dimensions ou de condensats confinés en 1D ou 2D. Une possibilité intéressante offerte par les condensats de Bose-Einstein est celle de mélanger des condensats formés de plusieurs types de bosons différents. On peut alors coupler des excitations dans les différents condensats en plaçant par exemple un vortex droit dans la première composante et un vortex ring dans la seconde. Parmi les différentes études sur le problème de Bogoliubov-de Gennes, on peut noter :

- Le travail de Law et al. (2002) où une analyse du mode d'énergie négative dans des états comportant entre 1 et 5 solitons sombres en 1D a été effectuée. Une discrétisation par différences finies est utilisée, et la bibliothèque Eispack permet le calcul des valeurs propres de BdG.
- Middelkamp et al. (2010b) a calculé le spectre de Bogoliubov en fonction du potentiel chimique μ pour le soliton sombre et différentes configurations de vortex en 2D.
- Dans les travaux de Bisset et al. (2015a,b); Wang et al. (2017), différentes configurations 3D (soliton sombre, vortex, vortex rings, hopfions, etc.) ont été étudiées. Une transformation de Fourier-Hankel permet d'utiliser la symétrie azimuthale du système pour étudier un problème en deux dimensions. Cette technique a été introduite par Ronen et al. (2006) pour l'étude du spectre de BdG de condensats dipolaires (avec un terme d'interaction non-local).
- Charalampidis et al. (2018) ont utilisé une technique de continuation avec déflation pour étudier les différentes branches de solutions pour un condensat en deux dimensions. Ce travail est étendu en trois dimensions par Boullé et al. (2020). La continuation avec déflation permet en connaissant une solution (par exemple l'état fondamental) de détecter les autres branches de solutions existantes afin d'avoir un panorama sur l'ensemble des états possibles pour le condensat. Elle a été introduite dans le cadre général des équations aux dérivées partielles par Farrell et al. (2015). L'approche numérique de Charalampidis

et al. (2018) combine une première résolution de l'équation de Gross-Pitaevskii sur un maillage grossier par éléments finis (avec le logiciel FEniCS) puis une deuxième résolution avec un maillage fin par différences finies. Le calcul des valeurs propres est réalisé par la bibliothèque FEAST (Polizzi, 2009). Dans le travail de Boullé et al. (2020), l'équation de Gross-Pitaevskii est résolue sur un maillage hexagonal par des éléments finis cubiques avec le logiciel Firedrake et le calcul des valeurs propres utilise une méthode de Krylov-Schur implémentée dans SLEPc (Balay et al., 1997).

- Danaila et al. (2016) ont utilisé une résolution par éléments finis avec FreeFem++ pour étudier des solitons dans des condensats avec deux composantes en 1D et 2D. Le calcul des valeurs propres utilise l'intégration dans FreeFem++ de la bibliothèque ARPACK (Lehoucq et al., 1998).
- Charalampidis et al. (2020) a utilisé la continuation avec déflation pour obtenir un panorama des états possibles dans des condensats à deux composantes en deux dimensions. L'approche numérique est la même que dans Charalampidis et al. (2018). La technique est étendue en trois dimensions par Boullé et al. (2022) avec le résultat étonnant de l'existence d'états dynamiquement stables.

Le but du travail réalisé ici est la réalisation de toolbox éléments finis permettant le calcul des modes de BdG en utilisant les fonctionnalités disponibles dans FreeFem++ et les bibliothèques qui y sont liées: adaptation de maillage, parallélisme, etc. Deux codes ont été réalisés: le premier est une toolbox séquentielle utilisant ARPACK pour les problèmes en une et deux dimensions, le deuxième est un code parallèle basé sur PETSc et SLEPc permettant l'étude de configurations 3D complexes. Ces deux codes sont simples d'utilisation et vont être distribués librement. Il n'existe pas aujourd'hui (à notre connaissance) de programme accessible publiquement pour la résolution des équations de Bogoliubov-de Gennes. La seule exception est le code Fortran FACTs (Fluctuations in Atomic Condensates), de Roy et al. (2020) dans la bibliothèque de programmes de Computer Physics Communications (CPC). Ce code est conçu pour l'étude des fluctuations dans les condensats à deux composantes à température finie, ce qui est un problème proche mais différent.

L'organisation de ce chapitre est la suivante: nous commençons par présenter dans la section 4.1 le modèle de Bogoliubov-de Gennes pour les condensats ainsi que le contexte lié à la recherche des états stationnaires. Les sections 4.2 et 4.3 sont dédiées aux méthodes numériques utilisées pour la résolution de ces équations. Enfin, les résultats numériques et les étapes de validation du code sont présentés en section 4.5.

4.1. Modèle de Bogoliubov-de Gennes

4.1.1. Modèle de Bogoliubov-de Gennes

Le modèle de Bogoliubov-de Gennes décrit la stabilité linéaire autour d'un état stationnaire ϕ de l'équation de Gross-Pitaevskii. Pour l'obtenir, on va remplacer $\psi(\mathbf{x}, t)$ dans l'équation (2.20) par $(\phi(\mathbf{x}) + \delta\phi(\mathbf{x}, t))e^{-\frac{i}{\hbar}\mu t}$ où ϕ est solution de (2.25). En négligeant les termes quadratiques en $\delta\phi$, on obtient:

$$i\hbar \frac{\partial \delta\phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \delta\phi + V_{\text{trap}} \delta\phi + g\phi^2 \bar{\delta\phi} + 2g|\phi|^2 \delta\phi - \mu \delta\phi. \quad (4.1)$$

En considérant une perturbation sous la forme $\delta\phi(\mathbf{x}, t) = A(\mathbf{x})e^{-i\omega t} + \bar{B}(\mathbf{x})e^{i\bar{\omega}t}$ et en séparant les termes en $e^{-i\omega t}$ de ceux en $e^{i\bar{\omega}t}$, on obtient le problème aux valeurs propres de Bogoliubov-de Gennes:

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H} - \mu + 2g|\phi|^2 & g\phi^2 \\ -g\bar{\phi}^2 & -(\mathcal{H} - \mu + 2g|\phi|^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

avec $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{trap}}$. Parmi les propriétés de ce modèle, on peut noter les suivantes:

- $\omega = \omega_r + i\omega_i$ est une fréquence complexe. Sa partie imaginaire ω_i indique la stabilité de l'état: si $\omega_i = 0$, alors celui-ci est dynamiquement stable.
- 0 est toujours une valeur propre de (4.2) et est associé à l'invariance de phase de l'équation de Gross-Pitaevskii (Pitaevskii and Stringari, 2003). Le vecteur propre associé est:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} \phi \\ -\bar{\phi} \end{pmatrix}, \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (4.3)$$

- Pour chaque solution (ω, A, B) , une deuxième solution est $(-\bar{\omega}, \bar{B}, \bar{A})$. Elle correspond à la même excitation $\delta\phi$ si $\omega_i = 0$.
- Si l'on s'intéresse à la différence d'énergie $\delta\mathcal{E}$ entre l'état stationnaire ϕ et l'état excité $\phi + \delta\phi$, on peut montrer (Pitaevskii and Stringari, 2003) qu'elle s'exprime sous la forme:

$$\delta\mathcal{E} = \hbar\omega \int (|A|^2 - |B|^2) d\mathbf{x}. \quad (4.4)$$

On note $K = \text{sign}(\delta\mathcal{E})$ la signature de Krein (Chernyavsky et al., 2018) qui correspond au signe de la différence d'énergie. Si $K > 0$ pour l'ensemble des modes, alors l'état stationnaire est le minimum global de l'énergie, donc l'état fondamental. Au contraire, si il existe un mode pour lequel $K < 0$, alors l'excitation diminue l'énergie du condensat et l'état est énergétiquement instable: il disparaît en présence de dissipation.

4.1.2. États stationnaires de Gross-Pitaevskii

Les états stationnaires des condensats sont solutions de l'équation de Gross-Pitaevskii sans rotation:

$$\mu\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + V_{\text{trap}}\phi + g|\phi|^2\phi, \quad (4.5)$$

sous la contrainte de normalisation (2.5), que l'on peut réécrire pour ϕ :

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\phi|^2 = N. \quad (4.6)$$

Le potentiel chimique μ est obtenu via la formule (2.26). Dans les travaux mentionnés plus haut sur les modes de Bogoliubov-de Gennes, ce n'est pas cette approche qui est choisie: au lieu du nombre d'atomes N , c'est le potentiel chimique qui est fixé. Ainsi, on résout l'équation (4.5) en fixant μ , et la contrainte (4.6) n'est plus prise en compte (mais permet toujours le calcul du nombre d'atomes). Deux situations limites existent:

- Dans le cas où l'interaction g est faible, le terme non-linéaire peut être négligé. On parle donc de limite linéaire. On obtient alors l'équation de Schrödinger:

$$\mu\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + V_{\text{trap}}\phi. \quad (4.7)$$

Dans le cas usuel d'un potentiel harmonique, les solutions de cette équation sont alors les états propres de l'oscillateur harmonique quantique (Boullé et al., 2020). En coordonnées cartésiennes, on a par exemple les états suivants (pour $k, l, m \in \mathbb{N}$):

$$\phi_{|k,l,m\rangle} \propto H_k(\sqrt{\omega_x}x)H_l(\sqrt{\omega_y}y)H_m(\sqrt{\omega_z}z)e^{-\frac{1}{2}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)}, \quad (4.8)$$

$$\mu_{|k,l,m\rangle} = \omega_x(k + \frac{1}{2}) + \omega_y(l + \frac{1}{2}) + \omega_z(m + \frac{1}{2}), \quad (4.9)$$

avec $H_{k,l,m}$ les polynômes de Hermite. Des expressions similaires existent pour les coordonnées cylindriques (r, θ, z) , avec $k, m \in \mathbb{N}$ et $l \in \mathbb{Z}$:

$$\phi_{|k,l,m\rangle} \propto r^l L_k^l(\omega_\perp r^2) H_m(\sqrt{\omega_z}z) e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}(\omega_\perp r^2 + \omega_z z^2)}, \quad (4.10)$$

$$\mu_{|k,l,m\rangle} = \omega_\perp(2k + |l| + 1) + \omega_z(m + \frac{1}{2}), \quad (4.11)$$

et sphériques (R, θ, ϕ) , avec $k, l \in \mathbb{N}$ et $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$:

$$\phi_{|k,l,m\rangle} \propto R^l L_k^l(\omega_\perp R^2) Y_{lm}(\theta, \phi) e^{-\frac{1}{2}\omega_\perp R^2}, \quad (4.12)$$

$$\mu_{|k,l,m\rangle} = \omega_\perp(2k + l + \frac{3}{2}), \quad (4.13)$$

avec L_k^l les polynômes de Laguerre et Y_{lm} les harmoniques sphériques.

- Dans le cas d'une interaction forte, c'est le terme du laplacien qui peut être négligé, et on retrouve alors le régime de Thomas-Fermi.

Ces deux limites sont respectivement associées aux faibles et aux fortes valeurs de μ . Le potentiel chimique obtenu dans la limite linéaire est ainsi la valeur minimale possible pour cet état. Ces deux limites sont utilisées pour obtenir les états stationnaires. Dans le cadre du régime de Thomas-Fermi, la densité n_{TF} peut être multipliée par une approximation de l'excitation pour ajouter un soliton ou un vortex. Dans le cadre de la limite linéaire, il faut déterminer l'état $|k, l, m\rangle$ (ou la combinaison linéaire d'états) associé à l'excitation recherchée. Les expressions dans la limite linéaire d'états tels que des anneaux de vortex parallèles et perpendiculaires ou des vortex en étoiles ont été données par Crasovan et al. (2004). A partir des deux limites, une continuation sur le paramètre μ peut être utilisée pour atteindre l'état voulu.

4.1.3. Condensats à deux composantes

Une des possibilités offertes par les condensats de Bose-Einstein est la possibilité de réaliser des mélanges. Il peut s'agir de deux types de bosons différents (par exemple du potassium et du rubidium dans les expériences de Modugno et al. (2002)), ou d'une distinction entre des états de spin ou hyperfins d'une même espèce atomique. On ne parlera ici que du mélange de deux composantes, mais des expériences considérant plus d'espèces ont été réalisées (par exemple par Chang et al. (2004) avec trois et cinq états de spin d'atomes de rubidium). Le modèle le plus simple dans ce cas est de considérer deux équations de Gross-Pitaevskii pour les fonctions d'ondes ψ_1 et ψ_2 associées aux deux composantes:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_1 + V_{\text{trap}} \psi_1 + g_{11} |\psi_1|^2 \psi_1 + g_{12} |\psi_2|^2 \psi_1, \\ i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_2 + V_{\text{trap}} \psi_2 + g_{22} |\psi_2|^2 \psi_2 + g_{21} |\psi_1|^2 \psi_2, \end{cases} \quad (4.14)$$

où g_{11} et g_{22} représentent les interactions intra-composantes et g_{12} et g_{21} l'interaction entre les deux condensats. L'énergie totale est donnée par la somme des énergies des deux composantes:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\psi_1, \psi_2) = & \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\hbar^2}{2m} (|\nabla \psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 + |\nabla \psi_2(\mathbf{x}, t)|^2) + V_{\text{trap}}(\mathbf{x}) (|\psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{x}, t)|^2) \\ & + \frac{1}{2} (g_{11}|\psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 + g_{12}|\psi_2(\mathbf{x}, t)|^2) |\psi_1(\mathbf{x}, t)|^2 \\ & + \frac{1}{2} (g_{22}|\psi_2(\mathbf{x}, t)|^2 + g_{21}|\psi_1(\mathbf{x}, t)|^2) |\psi_2(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Il est possible de chercher les états stationnaires du mélange en prenant les ansatz $\psi_1 = \phi_1 e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_1 t}$ et $\psi_2 = \phi_2 e^{-\frac{i}{\hbar}\mu_2 t}$ pour obtenir le système suivant:

$$\begin{cases} \mu_1 \phi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_1 + V_{\text{trap}} \phi_1 + g_{11}|\phi_1|^2 \phi_1 + g_{12}|\phi_2|^2 \phi_1, \\ \mu_2 \phi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_2 + V_{\text{trap}} \phi_2 + g_{22}|\phi_2|^2 \phi_2 + g_{21}|\phi_1|^2 \phi_2. \end{cases} \quad (4.16)$$

Avec les perturbations:

$$\begin{cases} \delta \phi_1(\mathbf{x}) = A(\mathbf{x}) e^{-i\omega t} + \bar{B}(\mathbf{x}) e^{i\bar{\omega} t}, \\ \delta \phi_2(\mathbf{x}) = C(\mathbf{x}) e^{-i\omega t} + \bar{D}(\mathbf{x}) e^{i\bar{\omega} t}, \end{cases} \quad (4.17)$$

le système de Bogoliubov-de Gennes devient:

$$M \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \hbar \omega \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

où:

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & g_{11}\phi_1^2 & g_{12}\phi_1\bar{\phi}_2 & g_{12}\phi_1\phi_2 \\ -g_{11}\bar{\phi}_1^2 & m_{22} & -g_{12}\bar{\phi}_1\bar{\phi}_2 & -g_{12}\bar{\phi}_1\phi_2 \\ g_{12}\bar{\phi}_1\phi_2 & g_{21}\phi_1\phi_2 & m_{33} & g_{22}\phi_2^2 \\ -g_{12}\bar{\phi}_1\bar{\phi}_2 & -g_{21}\phi_1\bar{\phi}_2 & -g_{22}\bar{\phi}_2^2 & m_{44} \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

avec

$$\begin{cases} \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{trap}}, \\ m_{11} = \mathcal{H} - \mu_1 + 2g_{11}|\phi_1|^2 + g_{12}|\phi_2|^2, \\ m_{22} = -\mathcal{H} + \mu_1 - 2g_{11}|\phi_1|^2 - g_{12}|\phi_2|^2 = -m_{11}, \\ m_{33} = \mathcal{H} - \mu_2 + g_{21}|\phi_1|^2 + 2g_{22}|\phi_2|^2, \\ m_{44} = -\mathcal{H} + \mu_2 - g_{21}|\phi_1|^2 - 2g_{22}|\phi_2|^2 = -m_{33}. \end{cases} \quad (4.20)$$

Pour obtenir une solution dans la limite linéaire avec deux composantes, la méthode est la suivante:

- On commence par résoudre un problème à une composante pour obtenir un couple (μ_1, ϕ_1) .
- On néglige alors le terme $g_{22}|\phi_2|^2 \phi_2$ dans la deuxième équation (4.16), ce qui donne une équation de Schrödinger avec un terme de potentiel ajouté par la première composante:

$$\mu_2 \phi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_2 + (V_{\text{trap}} + g_{21}|\phi_1|^2) \phi_2. \quad (4.21)$$

- Il s'agit d'un problème aux valeurs propres dont les solutions (μ_2, ϕ_2) sont les états dans la limite linéaire de la deuxième composante.

- On résout ensuite le système complet (4.14) pour prendre en compte les autres interactions non-linéaires.

La limite de Thomas-Fermi pour la deuxième composante est donnée par:

$$\phi_2 = \frac{1}{g_{22}}(\mu_2 - V_{\text{trap}} - g_{21}|\phi_1|^2). \quad (4.22)$$

4.1.4. Adimensionnement

En considérant la dépendance à μ au lieu de la normalisation, l'adimensionnement présenté en section 2.7 peut être modifié: au lieu de transformer la contrainte sur N pour obtenir une norme unitaire, on va rendre la constante g unitaire. Pour cela, on pose:

$$\tilde{t} = \frac{t}{t_{\text{ref}}}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{x_{\text{ref}}}, \quad \tilde{\phi} = \frac{\phi}{\phi_0}. \quad (4.23)$$

Les échelles de temps et d'espace sont de nouveau données par le potentiel: en prenant $\omega_d = \omega_\perp$ en 1D et 3D ou $\omega_d = \omega_z$ en 2D, on obtient $t_{\text{ref}} = \frac{1}{\omega_d}$ et $x_{\text{ref}} = a^{ho} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_d}}$. Le coefficient non-linéaire devient $\beta = \frac{g\phi_0^2}{\hbar\omega_d}$, ce qui donne la valeur à prendre pour ϕ_0 :

$$\phi_0 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2a_s}} & \text{en 1D,} \\ \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{2\pi}a_s a_z^{ho}}} & \text{en 2D,} \\ \sqrt{\frac{m\omega_\perp}{4\pi\hbar a_s}} & \text{en 3D.} \end{cases} \quad (4.24)$$

On considère uniquement un potentiel harmonique et isotrope dans les directions x et y :

$$C_{\text{trap}} = \begin{cases} \frac{1}{2}(a_z \tilde{z}^2) & \text{en 1D,} \\ \frac{1}{2}(a_x \tilde{x}^2 + a_y \tilde{y}^2) & \text{en 2D,} \\ \frac{1}{2}(a_x \tilde{x}^2 + a_y \tilde{y}^2 + a_z \tilde{z}^2) & \text{en 3D.} \end{cases} \quad (4.25)$$

On peut exprimer les coefficients du potentiel de la façon suivante:

$$\begin{cases} \text{en 1D : } a_z = \tilde{\omega}_z^2, & \tilde{\omega}_z = \frac{\omega_z}{\omega_\perp}, \\ \text{en 2D : } a_x = a_y = a_\perp = \tilde{\omega}_\perp^2, & \tilde{\omega}_\perp = \frac{\omega_\perp}{\omega_z}, \\ \text{en 3D : } a_x = a_y = 1, \ a_z = \tilde{\omega}_z^2, & \tilde{\omega}_z = \frac{\omega_z}{\omega_\perp}. \end{cases} \quad (4.26)$$

L'équation adimensionnée est:

$$\tilde{\mu}\tilde{\phi} = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2\tilde{\phi} + C_{\text{trap}}\tilde{\phi} + \beta|\tilde{\phi}|^2\tilde{\phi}, \quad (4.27)$$

avec $\tilde{\mu} = \frac{\mu}{\hbar\omega_d}$. Pour la dépendance temporelle, on a $\tilde{\psi} = \tilde{\phi}e^{-i\tilde{\mu}\tilde{t}}$. Le système BdG devient:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathcal{H}} - \tilde{\mu} + 2|\tilde{\phi}|^2 & \tilde{\phi}^2 \\ -\tilde{\phi}^2 & -(\tilde{\mathcal{H}} - \tilde{\mu} + 2|\tilde{\phi}|^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \tilde{\omega} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

où $\tilde{\omega} = \frac{\omega}{\omega_d}$ et $\tilde{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2 + C_{\text{trap}}$. Pour le cas avec deux composantes, on va adimensionner les fonctions d'ondes en suivant $\tilde{\phi}_1 = \frac{\phi_1}{\phi_{0,1}}$ et $\tilde{\phi}_2 = \frac{\phi_2}{\phi_{0,2}}$. En prenant $\phi_{0,1} = \phi_{0,2}$, on obtient le système suivant:

$$\begin{cases} \tilde{\mu}_1 \tilde{\phi}_1 = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi}_1 + C_{\text{trap}} \tilde{\phi}_1 + \beta_{11} |\tilde{\phi}_1|^2 \tilde{\phi}_1 + \beta_{12} |\tilde{\phi}_2|^2 \tilde{\phi}_1, \\ \tilde{\mu}_2 \tilde{\phi}_2 = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi}_2 + C_{\text{trap}} \tilde{\phi}_2 + \beta_{22} |\tilde{\phi}_2|^2 \tilde{\phi}_2 + \beta_{21} |\tilde{\phi}_1|^2 \tilde{\phi}_2. \end{cases} \quad (4.29)$$

On a $\beta_{11} = \frac{g_{11}}{\hbar\omega_d} \phi_{0,1}^2$, avec des expressions similaires pour les autres constantes d'interaction. $\phi_{0,1}$ peut alors être choisi pour mettre un des coefficients β_{11} , β_{12} , β_{21} et β_{22} à 1. Dans le travail de [Danaila et al. \(2016\)](#), c'est l'interaction interne aux composantes qui vaut 1: $\beta_{11} = \beta_{22} = 1$ et $\beta_{12} = \beta_{21}$ est varié par continuation de 0 à 1. Au contraire, [Charalampidis et al. \(2020\)](#) utilise l'interaction entre les composantes pour la mise à l'échelle: $\beta_{12} = \beta_{21} = 1$, et $\beta_{11} = 1.03$, $\beta_{22} = 0.97$. Dans la suite de ce chapitre, la notation $\tilde{\cdot}$ est abandonnée et les grandeurs considérées seront sans dimension.

4.2. Méthode de Newton pour la recherche des états stationnaires

4.2.1. Etat stationnaire à une composante

L'équation (4.27) est résolue avec FreeFem++ par une méthode de Newton avec une discrétisation par éléments finis sur un domaine $\mathcal{D}$. La première étape est la séparation de la fonction d'onde en parties réelles et imaginaires: $\phi = \phi_r + i\phi_i$. On obtient alors le système d'équation suivant:

$$\begin{cases} -\mu\phi_r - \frac{1}{2}\nabla^2\phi_r + C_{\text{trap}}\phi_r + \beta f(\phi_r, \phi_i)\phi_r = 0, \\ -\mu\phi_i - \frac{1}{2}\nabla^2\phi_i + C_{\text{trap}}\phi_i + \beta f(\phi_r, \phi_i)\phi_i = 0, \end{cases} \quad (4.30)$$

avec $f(\phi_r, \phi_i) = \phi_r^2 + \phi_i^2$. Les conditions aux bords sont de type Dirichlet homogène: $\phi_r = \phi_i = 0$ sur $\partial\mathcal{D}$. ϕ_r et ϕ_i sont cherchées dans l'espace de Sobolev $V = H_0^1(\mathcal{D})$. La formulation faible associée à l'équation (4.30) est: trouver $(\phi_r, \phi_i) \in V \times V$ tel que $\forall (v_r, v_i) \in V \times V$:

$$\begin{cases} \mathcal{F}_r(\phi_r, \phi_i, v_r) = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu)\phi_r v_r + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla\phi_r \cdot \nabla v_r + \int_{\mathcal{D}} \beta f(\phi_r, \phi_i)\phi_r v_r = 0, \\ \mathcal{F}_i(\phi_r, \phi_i, v_i) = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu)\phi_i v_i + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2}\nabla\phi_i \cdot \nabla v_i + \int_{\mathcal{D}} \beta f(\phi_r, \phi_i)\phi_i v_i = 0. \end{cases} \quad (4.31)$$

Cette équation est résolue par une méthode de Newton: à partir d'une solution initiale (ϕ_r^0, ϕ_i^0) , on va construire une séquence (ϕ_r^k, ϕ_i^k) en résolvant pour chaque itération k :

$$\begin{pmatrix} \left[\frac{\partial \mathcal{F}_r}{\partial \phi_r} \right]_{\phi_r=\phi_r^k, \phi_i=\phi_i^k} & \left[\frac{\partial \mathcal{F}_r}{\partial \phi_i} \right]_{\phi_r=\phi_r^k, \phi_i=\phi_i^k} \\ \left[\frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \phi_r} \right]_{\phi_r=\phi_r^k, \phi_i=\phi_i^k} & \left[\frac{\partial \mathcal{F}_i}{\partial \phi_i} \right]_{\phi_r=\phi_r^k, \phi_i=\phi_i^k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_r(\phi_r^k, \phi_i^k, v_r) \\ \mathcal{F}_i(\phi_r^k, \phi_i^k, v_i) \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Les incréments associés aux itérations de Newton sont:

$$q = \phi_r^k - \phi_r^{k+1}, \quad s = \phi_i^k - \phi_i^{k+1}. \quad (4.33)$$

On obtient finalement la formulation variationnelle suivante qui est résolue dans FreeFem++:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) q v_r + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla q \cdot \nabla v_r + \int_{\mathcal{D}} \beta \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_r^k, \phi_i^k) \phi_r^k q + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_r^k, \phi_i^k) \phi_r^k s + f(\phi_r^k, \phi_i^k) q \right) v_r \\ \quad = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) \phi_r^k v_r + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_r^k \cdot \nabla v_r + \int_{\mathcal{D}} \beta f(\phi_r^k, \phi_i^k) \phi_r^k v_r, \\ \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) s v_i + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla s \cdot \nabla v_i + \int_{\mathcal{D}} \beta \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_r^k, \phi_i^k) \phi_i^k q + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_r^k, \phi_i^k) \phi_i^k s + f(\phi_r^k, \phi_i^k) s \right) v_i \\ \quad = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) \phi_i^k v_i + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_i^k \cdot \nabla v_i + \int_{\mathcal{D}} \beta f(\phi_r^k, \phi_i^k) \phi_i^k v_i. \end{array} \right. \quad (4.34)$$

4.2.2. État stationnaire à deux composantes

Dans le cas avec deux composantes, la méthode est identique. On commence par séparer les parties réelles et imaginaires des fonctions d'ondes $\phi_1 = \phi_{1r} + i\phi_{1i}$ et $\phi_2 = \phi_{2r} + i\phi_{2i}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\mu_1 \phi_{1r} - \frac{1}{2} \nabla^2 \phi_{1r} + C_{\text{trap}} \phi_{1r} + \beta_{11} f(\phi_{1r}, \phi_{1i}) \phi_{1r} + \beta_{12} f(\phi_{2r}, \phi_{2i}) \phi_{1r} = 0, \\ -\mu_1 \phi_{1i} - \frac{1}{2} \nabla^2 \phi_{1i} + C_{\text{trap}} \phi_{1i} + \beta_{11} f(\phi_{1r}, \phi_{1i}) \phi_{1i} + \beta_{12} f(\phi_{2r}, \phi_{2i}) \phi_{1i} = 0, \\ -\mu_2 \phi_{2r} - \frac{1}{2} \nabla^2 \phi_{2r} + C_{\text{trap}} \phi_{2r} + \beta_{22} f(\phi_{2r}, \phi_{2i}) \phi_{2r} + \beta_{21} f(\phi_{1r}, \phi_{1i}) \phi_{2r} = 0, \\ -\mu_2 \phi_{2i} - \frac{1}{2} \nabla^2 \phi_{2i} + C_{\text{trap}} \phi_{2i} + \beta_{22} f(\phi_{2r}, \phi_{2i}) \phi_{2i} + \beta_{21} f(\phi_{1r}, \phi_{1i}) \phi_{2i} = 0. \end{array} \right. \quad (4.35)$$

Les conditions aux limites sont de type Dirichlet homogène: $\phi_{1r} = \phi_{1i} = \phi_{2r} = \phi_{2i} = 0$ sur $\partial\mathcal{D}$. La formulation faible de l'équation (4.35) peut s'écrire: trouver $(\phi_{1r}, \phi_{1i}, \phi_{2r}, \phi_{2i}) \in V \times V \times V \times V$, tels que $\forall (v_{1r}, v_{1i}, v_{2r}, v_{2i}) \in V \times V \times V \times V$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{F}_{1r} = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_1) \phi_{1r} v_{1r} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{1r} \cdot \nabla v_{1r} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{11} f(\phi_{1r}, \phi_{1i}) + \beta_{12} f(\phi_{2r}, \phi_{2i})) \phi_{1r} v_{1r} = 0, \\ \mathcal{F}_{1i} = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_1) \phi_{1i} v_{1i} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{1i} \cdot \nabla v_{1i} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{11} f(\phi_{1r}, \phi_{1i}) + \beta_{12} f(\phi_{2r}, \phi_{2i})) \phi_{1i} v_{1i} = 0, \\ \mathcal{F}_{2r} = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_2) \phi_{2r} v_{2r} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{2r} \cdot \nabla v_{2r} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{22} f(\phi_{2r}, \phi_{2i}) + \beta_{21} f(\phi_{1r}, \phi_{1i})) \phi_{2r} v_{2r} = 0, \\ \mathcal{F}_{2i} = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_2) \phi_{2i} v_{2i} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{2i} \cdot \nabla v_{2i} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{22} f(\phi_{2r}, \phi_{2i}) + \beta_{21} f(\phi_{1r}, \phi_{1i})) \phi_{2i} v_{2i} = 0. \end{array} \right. \quad (4.36)$$

Le système à résoudre est alors:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{F}_{1r}}{\partial \phi_{1r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{1r}}{\partial \phi_{1i}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{1r}}{\partial \phi_{2r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{1r}}{\partial \phi_{2i}} \\ \frac{\partial \mathcal{F}_{1i}}{\partial \phi_{1r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{1i}}{\partial \phi_{1i}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{1i}}{\partial \phi_{2r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{1i}}{\partial \phi_{2i}} \\ \frac{\partial \mathcal{F}_{2r}}{\partial \phi_{1r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{2r}}{\partial \phi_{1i}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{2r}}{\partial \phi_{2r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{2r}}{\partial \phi_{2i}} \\ \frac{\partial \mathcal{F}_{2i}}{\partial \phi_{1r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{2i}}{\partial \phi_{1i}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{2i}}{\partial \phi_{2r}} & \frac{\partial \mathcal{F}_{2i}}{\partial \phi_{2i}} \end{pmatrix}_{\substack{\phi_{1r}=\phi_{1r}^k \\ \phi_{1i}=\phi_{1i}^k \\ \phi_{2r}=\phi_{2r}^k \\ \phi_{2i}=\phi_{2i}^k}} \begin{pmatrix} q_1 \\ s_1 \\ q_2 \\ s_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{1r}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k, \phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k, v_{1r}) \\ \mathcal{F}_{1i}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k, \phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k, v_{1i}) \\ \mathcal{F}_{2r}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k, \phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k, v_{2r}) \\ \mathcal{F}_{2i}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k, \phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k, v_{2i}) \end{pmatrix}. \quad (4.37)$$

Les incréments sont:

$$q_1 = \phi_{1r}^k - \phi_{1r}^{k+1}, \quad s_1 = \phi_{1i}^k - \phi_{1i}^{k+1}, \quad q_2 = \phi_{2r}^k - \phi_{2r}^{k+1}, \quad s_2 = \phi_{2i}^k - \phi_{2i}^{k+1}. \quad (4.38)$$

On résout alors un système de quatre équations qui est directement implémenté dans FreeFem++. On a pour la première composante:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_1) q_1 v_{1r} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla q_1 \cdot \nabla v_{1r} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{11} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) + \beta_{12} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k)) q_1 v_{1r} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{11} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{1r}^k q_1 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{1r}^k s_1 \right) v_{1r} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{12} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{1r}^k q_2 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{1r}^k s_2 \right) v_{1r} \\
 & = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_1) \phi_{1r}^k v_{1r} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{1r}^k \cdot \nabla v_{1r} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{11} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) + \beta_{12} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k)) \phi_{1r}^k v_{1r},
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_1) s_1 v_{1i} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla s_1 \cdot \nabla v_{1i} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{11} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) + \beta_{12} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k)) s_1 v_{1i} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{11} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{1i}^k q_1 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{1i}^k s_1 \right) v_{1i} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{12} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{1i}^k q_2 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{1i}^k s_2 \right) v_{1i} \\
 & = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_1) \phi_{1i}^k v_{1i} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{1i}^k \cdot \nabla v_{1i} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{11} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) + \beta_{12} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k)) \phi_{1i}^k v_{1i},
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

et pour la deuxième:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_2) q_2 v_{2r} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla q_2 \cdot \nabla v_{2r} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{22} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) + \beta_{21} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k)) q_2 v_{2r} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{22} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{2r}^k q_2 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{2r}^k s_2 \right) v_{2r} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{21} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{2r}^k q_1 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{2r}^k s_1 \right) v_{2r} \\
 & = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_2) \phi_{2r}^k v_{2r} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{2r}^k \cdot \nabla v_{2r} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{22} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) + \beta_{21} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k)) \phi_{2r}^k v_{2r},
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_2) s_2 v_{2i} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla s_2 \cdot \nabla v_{2i} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{22} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) + \beta_{21} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k)) s_2 v_{2i} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{22} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{2i}^k q_2 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) \phi_{2i}^k s_2 \right) v_{2i} \\
 & + \int_{\mathcal{D}} \beta_{21} \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_r}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{2i}^k q_1 + \frac{\partial f}{\partial \phi_i}(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k) \phi_{2i}^k s_1 \right) v_{2i} \\
 & = \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_2) \phi_{2i}^k v_{2i} + \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla \phi_{2i}^k \cdot \nabla v_{2i} + \int_{\mathcal{D}} (\beta_{22} f(\phi_{2r}^k, \phi_{2i}^k) + \beta_{21} f(\phi_{1r}^k, \phi_{1i}^k)) \phi_{2i}^k v_{2i}.
 \end{aligned} \tag{4.42}$$

4.3. Résolution de l'équation de Bogoliubov-de Gennes

Dans le cas à une composante, le système BdG peut s'écrire:

$$\begin{cases} \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 - \mu + C_{\text{trap}} + 2\beta|\phi|^2 \right) A + \beta\phi^2 B & = \omega A, \\ \left(\frac{1}{2} \nabla^2 + \mu - C_{\text{trap}} - 2\beta|\phi|^2 \right) B - \beta\bar{\phi}^2 A & = \omega B. \end{cases} \tag{4.43}$$

En multipliant par les fonctions tests v_1 et v_2 puis en intégrant, on obtient la formulation variationnelle du problème:

$$\begin{cases} \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla A \cdot \nabla v_1 + \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) A v_1 + \int_{\mathcal{D}} 2\beta |\phi|^2 A v_1 + \int_{\mathcal{D}} \beta \phi^2 B v_1 = \omega \int_{\mathcal{D}} A v_1, \\ - \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla B \cdot \nabla v_2 - \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) B v_2 - \int_{\mathcal{D}} 2\beta |\phi|^2 B v_2 - \int_{\mathcal{D}} \beta \bar{\phi}^2 A v_2 = \omega \int_{\mathcal{D}} B v_2. \end{cases} \quad (4.44)$$

C'est le terme bilinéaire à gauche de ce système qui, une fois discrétisé, forme la matrice dont les valeurs propres sont recherchées. Avec deux composantes, le système s'écrit:

$$\begin{cases} \left(\mathcal{H} - \mu_1 + 2\beta_{11} |\phi_1|^2 + \beta_{12} |\phi_2|^2 \right) A + \beta_{11} \phi_1^2 B + \beta_{12} \phi_1 \bar{\phi}_2 C + \beta_{12} \phi_1 \phi_2 D &= \omega A, \\ -\beta_{11} \bar{\phi}_1^2 A - \left(\mathcal{H} - \mu_1 + 2\beta_{11} |\phi_1|^2 + \beta_{12} |\phi_2|^2 \right) B - \beta_{12} \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_2 C - \beta_{12} \bar{\phi}_1 \phi_2 D &= \omega B, \\ \beta_{21} \bar{\phi}_1 \phi_2 A + \beta_{21} \phi_1 \phi_2 B + \left(\mathcal{H} - \mu_2 + 2\beta_{22} |\phi_2|^2 + \beta_{21} |\phi_1|^2 \right) C + \beta_{22} \phi_2^2 D &= \omega C, \\ -\beta_{21} \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_2 A - \beta_{21} \phi_1 \bar{\phi}_2 B - \beta_{22} \bar{\phi}_2^2 C - \left(\mathcal{H} - \mu_2 + 2\beta_{22} |\phi_2|^2 + \beta_{21} |\phi_1|^2 \right) D &= \omega D, \end{cases} \quad (4.45)$$

avec $\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + C_{\text{trap}}$. La formulation variationnelle est:

$$\begin{cases} \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla A \cdot \nabla v_1 + \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu_1) A v_1 + \int_{\mathcal{D}} \left(2\beta_{11} |\phi_1|^2 + \beta_{12} |\phi_2|^2 \right) A v_1 \\ \quad + \int_{\mathcal{D}} \beta_{11} \phi_1^2 B v_1 + \int_{\mathcal{D}} \beta_{12} \phi_1 \bar{\phi}_2 C v_1 + \int_{\mathcal{D}} \beta_{12} \phi_1 \phi_2 D v_1 = \omega \int_{\mathcal{D}} A v_1, \\ - \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla B \cdot \nabla v_2 - \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) B v_2 - \int_{\mathcal{D}} \left(2\beta_{11} |\phi_1|^2 + \beta_{12} |\phi_2|^2 \right) B v_2 \\ \quad - \int_{\mathcal{D}} \beta_{11} \bar{\phi}_1^2 A v_2 - \int_{\mathcal{D}} \beta_{12} \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_2 C v_2 - \int_{\mathcal{D}} \beta_{12} \bar{\phi}_1 \phi_2 D v_2 = \omega \int_{\mathcal{D}} B v_2, \\ \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla C \cdot \nabla v_3 + \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) C v_3 + \int_{\mathcal{D}} \left(2\beta_{22} |\phi_2|^2 + \beta_{21} |\phi_1|^2 \right) C v_3 \\ \quad + \int_{\mathcal{D}} \beta_{21} \bar{\phi}_1 \phi_2 A v_3 + \int_{\mathcal{D}} \beta_{21} \phi_1 \phi_2 B v_3 + \int_{\mathcal{D}} \beta_{22} \phi_2^2 D v_3 = \omega \int_{\mathcal{D}} C v_3, \\ - \int_{\mathcal{D}} \frac{1}{2} \nabla D \cdot \nabla v_4 - \int_{\mathcal{D}} (C_{\text{trap}} - \mu) D v_4 - \int_{\mathcal{D}} \left(2\beta_{22} |\phi_2|^2 + \beta_{21} |\phi_1|^2 \right) D v_4 \\ \quad - \int_{\mathcal{D}} \beta_{21} \bar{\phi}_1 \bar{\phi}_2 A v_4 - \int_{\mathcal{D}} \beta_{21} \phi_1 \bar{\phi}_2 B v_4 - \int_{\mathcal{D}} \beta_{22} \bar{\phi}_2^2 C v_4 = \omega \int_{\mathcal{D}} D v_4, \end{cases} \quad (4.46)$$

où v_1, v_2, v_3 et v_4 sont les fonctions tests. Il n'est pas nécessaire de séparer les parties réelles et imaginaires des fonctions d'ondes pour le calcul des valeurs propres. Cette décomposition est utilisée pour la méthode de Newton car l'écriture de la formulation variationnelle avec des variables complexes fait apparaître le conjugué de la fonction test et cette opération n'est pas possible dans FreeFem++.

4.4. Méthodes numériques

Les formulations variationnelles (4.34) et (4.39) sont directement résolues avec FreeFem++. Le domaine $\mathcal{D}$ est discrétisé pour obtenir un maillage Th formé de segments (1D), de triangles (2D) ou de tétraèdres (3D). Les fonctions d'ondes sont représentées par des éléments finis P2 (des tests numériques ont montré que l'utilisation d'éléments P1 ne permet pas une précision suffisante lors du calcul des valeurs et vecteurs propres). Les itérations de la méthode de Newton sont arrêtées suivant deux conditions, atteintes en pratique simultanément. La première vérifie la convergence de la méthode en regardant la norme de l'incrément:

$$\left\| \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} \right\|_{\infty} < 10^{-8}, \quad (4.47)$$

la deuxième valide que l'on a bien trouvé un zéro de l'équation de Gross-Pitaevskii:

$$\left\| \begin{pmatrix} \mathcal{F}_r \\ \mathcal{F}_i \end{pmatrix} \right\|_2 < 10^{-12}. \quad (4.48)$$

La méthode de résolution du système linéaire (4.32) est particulièrement importante. Si elle n'est pas suffisamment précise, la méthode de Newton ne converge pas. Pour résoudre ce problème, il est nécessaire d'utiliser un préconditionneur. Pour le code séquentiel, une décomposition LU incomplète est utilisée comme préconditionneur, et le système est résolu par une méthode GMRES. Afin d'éviter le temps de calcul lié au préconditionneur et à la méthode itérative lorsque leur utilisation n'est pas nécessaire, une méthode directe basée sur l'élimination de Gauss-Jordan et fournie par la bibliothèque MUMPS est utilisée lorsque la norme du résidu est supérieure à 10^{-3} . Dans la deuxième toolbox, utilisant la décomposition de domaine grâce à la bibliothèque PETSc (Balay et al., 1997), le système est résolu par GMRES avec un préconditionneur LU.

Un grand avantage de FreeFem++ est la possibilité d'adapter le maillage utilisé afin d'augmenter le nombre de triangles/tétraèdres dans les zones où la fonction d'onde varie le plus (typiquement autour des vortex et solitons ainsi que sur le bord du condensat). En 2D, l'adaptation est réalisée grâce à la commande `adaptmesh` de FreeFem++. L'idée derrière cette commande est de modifier le calcul de la métrique utilisée par le générateur du maillage. La nouvelle métrique est basée sur la hessienne de la fonction. En 3D, les bibliothèques `mshmet` et `mng3d` (Dapogny et al., 2014; Balarac et al., 2021) sont utilisées pour le calcul de la métrique puis la génération d'un maillage adapté à cette métrique. Le code parallèle utilise `parmmg` qui est la version parallélisée de `mng3d`.

Le calcul des valeurs propres est réalisé par la bibliothèque ARPACK (Lehoucq et al., 1998) qui utilise une méthode d'Arnoldi qui retourne les valeurs et vecteurs propres associés à la matrice éléments finis correspondant au membre de gauche de l'équation (4.46). Dans le code parallèle, une méthode de Krylov-Schur est utilisée grâce à la fonction `epssolve` de la bibliothèque SLEPc. Afin de tester la précision du calcul des valeurs propres, nous calculons le résidu:

$$\left\| M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} - \omega \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \right\|_\infty. \quad (4.49)$$

Des tests numériques nous ont permis de déterminer qu'il est intéressant d'ajouter un décalage, fixé à $\sigma = 10^{-4}$, car il permet de diminuer le résidu. Sur les cas étudiés par la suite, les résidus obtenus sont de l'ordre de 10^{-7} . En pratique, cela revient à ajouter le terme suivant à la matrice:

$$- \int_{\mathcal{D}} \sigma (Av_1 + Bv_2). \quad (4.50)$$

Une continuation (sur le potentiel chimique μ pour un condensat unique, sur μ et C_{g12} avec deux composantes) permet d'obtenir un état recherché en partant d'une solution initiale fabriquée à partir de la densité de Thomas-Fermi ou donnée par la limite linéaire. Pour ce faire, la solution convergée pour une valeur μ_0 est utilisée comme solution initiale du problème à une valeur $\mu_0 + \delta\mu$, avec $\delta\mu$ le pas utilisé dans la continuation. La limite linéaire donne une solution initiale adaptée à l'utilisation d'une méthode de Newton, aucun problème de convergence dû à la donnée initiale n'a été observé dans ce cas.

Le rayon de Thomas-Fermi r_{TF} permet de définir la taille du domaine $r_{dom} = 1.3 r_{TF}$. Le facteur utilisé pour définir r_{dom} doit être adapté pour chaque simulation. Il influe de façon importante sur la précision du calcul des valeurs et vecteurs propres. Un autre paramètre à ajuster est la taille des triangles ou tétraèdres, particulièrement si l'adaptation de maillage n'est pas utilisée. En ce qui concerne la forme du domaine, différentes solutions ont été testées: carré

et cercle en 2D, cube et sphère en 3D. De plus, il est possible de combiner deux maillages, comme dans l'exemple de la section 4.5.5, où le maillage extérieur est de forme circulaire, mais un maillage régulier carré plus fin est utilisé au centre du condensat.

4.5. Validation du code et résultats numériques

Différents cas tests en 1, 2 et 3D, et avec une ou deux composantes ont permis la validation du fonctionnement des codes et l'étude de leur performance. Les temps de calcul pour les différents cas tests sont présentés dans les tableaux 4.1 et 4.2. Lorsqu'une continuation est utilisée avec adaptation de maillage, le nombre de triangles ou tétraèdres varie. La taille de maillage indiquée dans le tableau correspond à la dernière itération. Concernant le temps CPU pour l'étape du calcul des valeurs propres de BdG, il faut noter que les résultats indiqués ont été obtenus en sauvegardant les vecteurs propres en format Tecplot et Paraview. Si la sauvegarde est désactivée, le temps de calcul est fortement réduit, notamment pour les problèmes en trois dimensions. On passe ainsi avec le code séquentiel et l'adaptation de maillage activée de 145 à 100 secondes pour la dernière itération dans le cas du vortex présenté en section 4.5.5 et de 633 à 286 secondes pour l'état fondamental en 3D de la section 4.5.7. Les résultats indiqués pour le code parallèle utilisent tous l'adaptation de maillage. Une description des toolbox et des différents paramètres utilisés dans le code est donnée en annexe B.

	Sans adaptation			Avec adaptation		
	temps CPU GP	temps CPU BdG	maillage	temps CPU GP	temps CPU BdG	maillage
État fondamental 1D	3	23	3602			
Soliton noir 1D	2	10	1920			
État fondamental 2D	11	101	10952	28	100	10605
Soliton noir 3D	8575	40944	42632	7318	15565	15472
Vortex central 2D	1066	9446	14200	1424	10336	16996
État fondamental 3D	1281	21178	48000	1025	14301	35087
État noir - anti-noir 1D	974	1342	2714			
Vortex - vortex anti-noir 2D	1124	8283	10469	1411	9647	8880
Vortex en anneau - vortex en anneau anti-noir	2439	21039	10469	3538	22244	10168

Table 4.1.: Temps de calcul et taille du maillage (nombre de triangles ou tétraèdres) pour les différents cas tests avec le code séquentiel. Si la continuation est utilisée, la taille de maillage indiquée correspond au dernier maillage utilisé.

	temps CPU GP	temps CPU BdG	maillage	nombre de coeurs
Soliton sombre 3D	4310.08	13567.7	12510	12
Etat fondamental 2D	1143.71	11039.3	10952	4
Bande de soliton sombre - claire	1055.79	7017.87	42632	4
Branche avec deux vortex	1598.08	4569.34	14200	4
Branche avec trois vortex	1281	21178	48000	4

Table 4.2.: Temps de calcul et taille du maillage (nombre de triangles ou tétraèdres) pour les différents cas tests avec le code parallèle.

4.5.1. État fondamental en 1D

Le premier cas test est le calcul de l'état fondamental d'un condensat en une dimension. Les valeurs propres pour cet état ont été calculées dans la limite de Thomas-Fermi par [Kevrekidis and Pelinovsky \(2010\)](#):

$$\omega_n^{TF} = \omega_z \sqrt{\frac{n(n+1)}{2}}, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (4.51)$$

On trouve dans le tableau 4.3 une comparaison entre les valeurs analytiques et les résultats numériques pour $\mu = 6$ et $\omega_z = 0.025$ avec un domaine de taille $1.3 r_{TF}$. La solution initiale est la densité de Thomas-Fermi (2.29). On retrouve bien les propriétés attendues:

- Les valeurs propres sont bien organisées en paires $(+\omega, -\bar{\omega})$.
- La première valeur propre est 0. Cette valeur est la plus difficile à obtenir numériquement.
- Les autres valeurs sont proches des résultats donnés par la formule (4.51).
- Les valeurs propres sont réelles, ce qui est attendu puisque l'état est dynamiquement stable.
- Les signatures de Krein sont toutes égales à 1, il n'y a pas d'excitations.

	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K	ω_n^{TF}
ω_1	2.79875e-14	-1.47286e-07	1	$\omega_0^{TF} = 0$
ω_2	-2.97344e-14	1.47286e-07	1	
ω_3	-0.02500	-2.03736e-11	1	$\omega_1^{TF} = \omega_z = 0.025$
ω_4	0.02500	1.71125e-11	1	
ω_5	-0.04330	-2.62722e-12	1	$\omega_2^{TF} \approx 0.04330$
ω_6	0.04330	-2.38518e-12	1	
ω_7	-0.06125	-5.75516e-11	1	$\omega_3^{TF} \approx 0.06123$
ω_8	0.06125	8.06723e-11	1	
ω_9	0.07909	-1.32626e-11	1	$\omega_4^{TF} \approx 0.07905$
ω_{10}	-0.07909	-1.33505e-11	1	

Table 4.3.: Valeurs propres et signatures de Krein pour l'état fondamental en 1D.

4.5.2. Soliton en 1D

Le deuxième cas test en 1D est un soliton noir. Ce système constitue le premier état excité de l'état fondamental étudié dans la section précédente et a été étudié numériquement par [Law et al. \(2002\)](#). La solution initiale est construite en multipliant la densité de Thomas-Fermi par le profil en tanh du soliton:

$$\phi_{DS} = \sqrt{n_{TF}} \tanh(\sqrt{\mu}z). \quad (4.52)$$

La tangente hyperbolique est l'expression exacte du soliton noir en l'absence de potentiel. Cette solution initiale est représentée en figure 4.1a avec la fonction d'onde convergée. Les premières valeurs propres sont présentées dans la table 4.4. Les valeurs sont réelles, ce qui est attendu puisque le soliton est un état stable en 1D. On retrouve plusieurs modes décrits par [Pitaevskii and Stringari \(2003\)](#) et [Frantzeskakis \(2010\)](#):

- Un mode à $\omega_3 \approx \frac{\omega_z}{\sqrt{2}} \approx 0.017677669$: il s'agit du mode anormal, sa signature de Krein est bien négative. Cette valeur propre est obtenue analytiquement dans la limite de Thomas-Fermi par [Busch and Anglin \(2000\)](#). Il est affiché en figure 4.1b et correspond au résultat obtenu par [Law et al. \(2002\)](#).
- Un mode à $\omega_5 \approx \omega_z = 0.025$. Cette valeur propre correspond au mode dipolaire, ou de Kohn. Il est associé à l'oscillation du centre de masse du condensat.
- Un mode à $\omega_7 \approx \omega_z \sqrt{3} \approx 0.04330127$: c'est le mode quadripolaire correspondant à un mode de respiration faisant osciller la taille du condensat.

	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K
ω_1	2.52166e-15	4.15343e-07	1
ω_2	-2.62678e-15	-4.15343e-07	1
ω_3	0.0177476	2.34549e-13	-1
ω_4	-0.0177476	1.55870e-12	-1
ω_5	-0.0250000	2.83799e-12	1
ω_6	0.0250000	-5.70410e-12	1
ω_7	0.0434250	-6.11975e-12	1
ω_8	-0.0434250	2.46865e-12	1
ω_9	-0.0614147	1.03156e-11	1
ω_{10}	0.0614147	-3.35969e-11	1

Table 4.4.: Valeurs propres et signatures de Krein pour un soliton sombre en 1D.

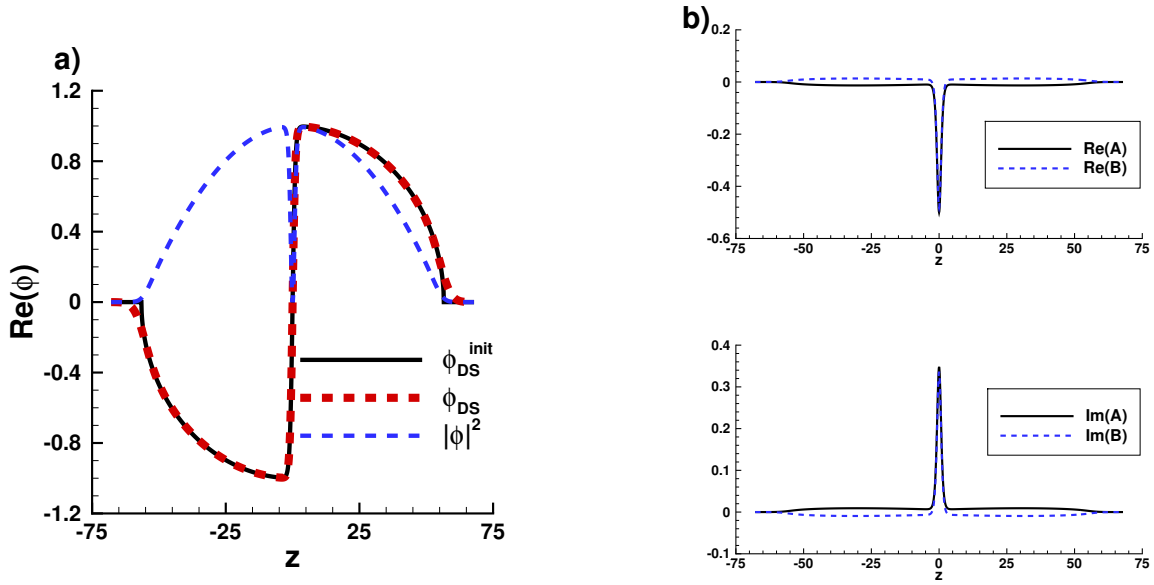


Figure 4.1.: Soliton sombre dans un condensat 1D: a) solutions initiale et convergée, b) mode associé à la deuxième valeur propre.

4.5.3. État fondamental en 2D

Comme pour le cas 1D, le premier cas test en 2D est l'état fondamental dans la limite de Thomas-Fermi. Les valeurs propres sont de nouveau données analytiquement par [Kevrekidis and Pelinovsky \(2010\)](#):

$$\omega_{m,k}^{TF} = \omega_{\perp} \sqrt{m + 2k(1 + m) + 2k^2}, \quad k, m \in \mathbb{N}. \quad (4.53)$$

On retrouve dans les tableaux 4.5 et 4.6 les premières valeurs propres calculées avec les codes séquentiels et parallèles pour les paramètres $\mu = 6$ et $\omega_{\perp} = 0.2$. On observe bien que les deux toolbox donnent les mêmes valeurs propres et que l'adaptation de maillage ne modifie pas les résultats. Le code parallèle donne des résultats satisfaisants mais on observe une baisse de précision au niveau de la première valeur propre (10^{-4} au lieu de 10^{-11}). Cela vient d'un soucis dans l'utilisation de l'interface entre FreeFem++ et SLEPc. Le problème a été résolu après l'écriture de ce document et des précisions similaires sont obtenues. Les maillages avec et sans adaptation sont présentés en figure 4.2, on retrouve bien une concentration des triangles sur la bordure du condensat où les variations de la fonction d'onde sont plus importantes dans le maillage adapté.

	Avec adaptation			Sans adaptation			$\omega_{m,k}$
	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K	
ω_1	2.07632e-06	-6.23637e-16	1	-7.49856e-15	-9.77440e-08	1	$\omega_{0,0} = 0$
ω_2	-2.07632e-06	6.79778e-16	1	7.59130e-15	9.77440e-08	1	
ω_3	-0.2	3.72622e-11	1	-0.2	1.59259e-11	1	$\omega_{1,0} = 0.2$
ω_4	0.2	-2.86491e-12	1	0.2	-5.68840e-11	1	
ω_5	-0.2	1.16272e-13	1	-0.2	-1.28018e-11	1	
ω_6	0.2	9.52340e-11	1	0.2	4.46585e-11	1	
ω_7	0.28344	-2.54085e-11	1	0.28344	-6.62093e-15	1	$\omega_{2,0} = 0.28284$
ω_8	-0.28344	5.14710e-11	1	-0.28344	8.87115e-12	1	
ω_9	-0.28344	3.41562e-12	1	0.28344	-1.12936e-13	1	
ω_{10}	0.28344	-8.62869e-11	1	-0.28344	1.93400e-11	1	
ω_{11}	-0.34874	1.42431e-11	1	-0.34875	1.06909e-10	1	$\omega_{3,0} = 0.34641$
ω_{12}	0.34874	1.57081e-11	1	0.34875	-1.45720e-11	1	
ω_{13}	0.34874	-7.37629e-11	1	-0.34875	4.74957e-11	1	
ω_{14}	-0.34874	-5.66029e-12	1	0.34875	5.34298e-11	1	
ω_{15}	-0.39999	-6.49028e-11	1	0.39999	-4.74739e-11	1	$\omega_{4,0} = \omega_{0,1} = 0.4$
ω_{16}	0.39999	-2.51356e-11	1	-0.39999	1.00556e-10	1	
ω_{17}	-0.40563	-4.17258e-12	1	-0.40563	-3.80533e-11	1	
ω_{18}	0.40563	3.23593e-11	1	0.40563	-6.77549e-11	1	
ω_{19}	-0.40563	-3.07323e-12	1	0.40563	-3.68372e-11	1	
ω_{20}	0.40563	6.64207e-12	1	-0.40563	-5.84568e-11	1	

Table 4.5.: Valeurs propres et signatures de Krein pour l'état fondamental en 2D, calculées avec le code séquentiel, avec et sans adaptation de maillage.

	Sans adaptation			Avec adaptation			$\omega_{m,k}^{TF}$
	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K	
ω_1	-0.0001	-7.33910e-16	1	-0.0001	3.68620e-07	1	$\omega_{0,0}^{TF} = 0$
ω_2	-9.79220e-05	7.06957e-16	1	-0.0001	-3.68620e-07	1	
ω_3	-0.2001	-4.25771e-12	1	-0.2001	-4.57555e-12	1	$\omega_{1,0}^{TF} = 0.2$
ω_4	0.1999	3.41327e-12	1	0.1999	3.53394e-12	1	
ω_5	-0.2001	3.37156e-12	1	-0.2001	-4.07970e-12	1	
ω_6	0.1999	-1.77405e-11	1	0.1999	9.90461e-13	1	
ω_7	-0.28354	-1.04668e-12	1	-0.28354	-2.31552e-12	1	$\omega_{2,0}^{TF} = 0.28284$
ω_8	0.28334	-4.40801e-12	1	0.28334	-3.75475e-12	1	
ω_9	-0.28354	4.36359e-12	1	-0.28354	5.27721e-12	1	
ω_{10}	0.28334	-3.06936e-13	1	0.28334	3.41928e-13	1	
ω_{11}	-0.34884	-5.16413e-13	1	-0.34885	-1.41802e-12	1	$\omega_{3,0}^{TF} = 0.34641$
ω_{12}	0.34864	1.06840e-13	1	0.34865	1.36935e-12	1	
ω_{13}	-0.34884	1.93753e-12	1	-0.34885	-1.19225e-13	1	
ω_{14}	0.34864	-2.45356e-12	1	0.34865	1.97924e-12	1	
ω_{15}	-0.40009	-9.59009e-12	1	-0.40010	1.32893e-11	1	$\omega_{4,0}^{TF} = \omega_{0,1}^{TF} = 0.4$
ω_{16}	0.39989	-1.56598e-11	1	0.39990	2.35426e-11	1	
ω_{17}	-0.40573	3.12860e-12	1	-0.40573	2.19662e-14	1	
ω_{18}	0.40553	4.08527e-12	1	0.40553	-1.01831e-12	1	
ω_{19}	-0.40573	7.48592e-13	1	-0.40573	4.44477e-13	1	
ω_{20}	0.40553	1.58123e-12	1	0.40553	1.32468e-12	1	

Table 4.6.: Valeurs propres et signatures de Krein pour l'état fondamental en 2D, calculées avec le code parallèle, avec et sans adaptation de maillage.

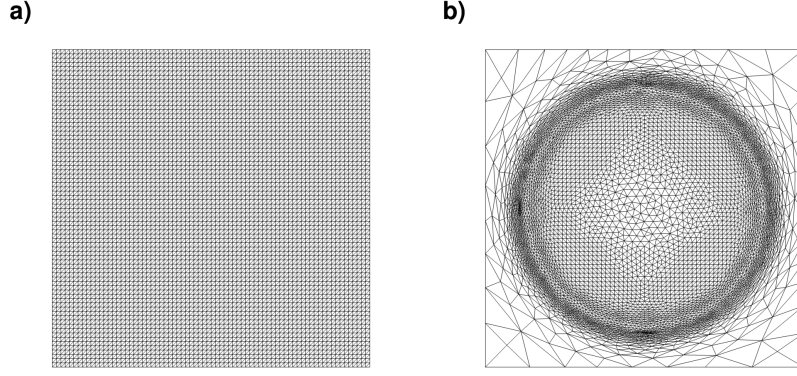


Figure 4.2.: Maillage uniforme a) avec adaptation b) pour l'état fondamental en 2D.

4.5.4. Vortex en 2D

Pour vérifier le calcul des signatures de Krein (et donc des vecteurs propres) en 2D, nous calculons les modes de Bogoliubov d'un condensat avec un vortex central. La solution initiale est obtenue en créant un profil de soliton en coordonnées polaires (r, θ) :

$$\phi_{VS} = \sqrt{n_{TF}} \tanh(\sqrt{\mu}r) e^{i\theta}. \quad (4.54)$$

Middelkamp et al. (2010b) ayant montré qu'un vortex ne peut exister que si $\mu > 2\omega_{\perp}$, nous avons choisi les paramètres suivants: $\omega_{\perp} = 0.2$ et $\mu = 3$. Les valeurs propres obtenues sont présentées dans les tableaux 4.7 et 4.8. On observe de nouveau les propriétés attendues pour les valeurs propres et les signatures de Krein.

4.5.5. Vortex central à partir de la limite linéaire

Afin d'approfondir l'étude du vortex, cet état est étudié pour différentes valeurs de μ grâce à une continuation depuis la limite linéaire. La solution initiale est donnée par l'état excité $|0, 1\rangle$ de l'oscillateur harmonique quantique en coordonnées cylindriques (équation (4.10)):

$$\phi_{VS} = \frac{\mu}{2} r L_0^1(\omega_{\perp} r^2) e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}\omega_{\perp} r^2} \quad (4.55)$$

où L_0^1 est un polynôme de Laguerre. Le potentiel est toujours caractérisé par $\omega_{\perp} = 0.2$, ce qui donne la valeur limite de $\mu_{VS} = 2\omega_{\perp} = 0.4$. Pour obtenir le premier état, il est nécessaire de s'éloigner un peu de la limite afin de prendre en compte le terme non-linéaire, et on prend $\mu = 1.05 \mu_{VS}$. Le spectre est affiché en figure 4.3. On retrouve les résultats donnés par Middelkamp et al. (2010a) et Middelkamp et al. (2010b):

- Le mode à $\omega = 0$ est associé à l'invariance de phase.
- Le mode de Kohn est indépendant de μ et vaut toujours $\omega = \omega_{\perp}$.
- Le mode anormal est lié à la précession du vortex. A partir des équations de mouvement du centre du vortex, Middelkamp et al. (2010a) ont obtenu dans la limite de Thomas-Fermi:

$$\omega = \frac{\omega_{\perp}^2}{2\mu} \ln\left(A \frac{\mu}{\omega_{\perp}}\right) \approx 0.03261667238, \quad A \approx 2\sqrt{2}\pi \approx 8.886. \quad (4.56)$$

- Un mode donné par Middelkamp et al. (2010a) dans la limite linéaire à $\omega = \mu - 2\omega_{\perp}$.

	Sans adaptation			Avec adaptation		
	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K
ω_1	-4.30674e-07	1.19430e-11	1	-3.57935e-07	-1.10255e-11	1
ω_2	4.30674e-07	-1.19430e-11	1	3.57935e-07	1.10255e-11	1
ω_3	-0.03276	4.34475e-11	-1	-0.03277	3.17533e-11	-1
ω_4	0.03276	-2.37988e-11	-1	0.03277	-4.42317e-12	-1
ω_5	-0.19999	3.61301e-10	1	-0.19999	-2.08322e-10	1
ω_6	0.19999	6.48508e-10	1	0.19999	-1.12710e-10	1
ω_7	-0.2	-5.65815e-11	1	-0.2	-3.17103e-10	1
ω_8	0.2	2.63500e-11	1	0.2	-2.64453e-10	1
ω_9	-0.26368	4.37599e-11	1	-0.26368	-1.31734e-10	1
ω_{10}	0.26368	-1.01262e-10	1	0.26368	-4.36461e-11	1
ω_{11}	-0.30413	7.03287e-11	1	-0.30413	-4.64402e-11	1
ω_{12}	0.30413	6.98365e-11	1	0.30413	-9.74015e-11	1
ω_{13}	-0.32627	1.20460e-10	1	-0.32628	-8.22790e-12	1
ω_{14}	0.32627	-6.03038e-11	1	0.32628	1.63267e-12	1
ω_{15}	-0.37997	-7.69693e-11	1	-0.37998	5.84810e-11	1
ω_{16}	0.37997	2.18463e-10	1	0.37998	-5.82940e-11	1
ω_{17}	-0.38303	7.05158e-11	1	-0.38303	9.55911e-12	1
ω_{18}	0.38303	5.84941e-11	1	0.38303	4.94774e-11	1
ω_{19}	-0.39999	-2.40254e-10	1	-0.39999	1.79541e-11	1
ω_{20}	0.39999	-4.10500e-10	1	0.39999	7.33946e-11	1

Table 4.7.: Valeurs propres et signatures de Krein pour le vortex central en 2D, calculées avec le code séquentiel, avec et sans adaptation de maillage.

	Sans adaptation			Avec adaptation		
	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K	$Re(\omega)$	$Im(\omega)$	K
ω_1	-1.00436e-04	-1.98671e-11	1	-1.00095e-04	-2.22714e-10	1
ω_2	-9.95639e-05	1.98671e-11	1	-9.99051e-05	2.22714e-10	1
ω_3	-0.03286	1.42614e-11	-1	-0.03287	5.36667e-10	-1
ω_4	0.03266	4.91050e-11	-1	0.03267	1.99533e-09	-1
ω_5	-0.20009	-3.89293e-12	1	-0.2001	-2.93268e-09	1
ω_6	0.19989	-2.48123e-11	1	0.1999	-4.79530e-10	1
ω_7	-0.2001	1.74365e-11	1	-0.2001	-4.56642e-09	1
ω_8	0.1999	-1.62834e-11	1	0.1999	-1.22430e-08	1
ω_9	-0.26378	-1.23547e-13	1	-0.26378	7.36796e-12	1
ω_{10}	0.26358	1.05531e-12	1	0.26358	3.06057e-10	1
ω_{11}	-0.30423	-4.79499e-13	1	-0.30423	3.17334e-10	1
ω_{12}	0.30403	1.48496e-12	1	0.30403	-3.89298e-11	1
ω_{13}	-0.32637	2.30777e-13	1	-0.32638	1.15434e-10	1
ω_{14}	0.32617	5.55087e-13	1	0.32618	1.63308e-11	1
ω_{15}	-0.38007	3.24897e-12	1	-0.38008	6.30025e-10	1
ω_{16}	0.37987	2.58075e-12	1	0.37988	-1.10661e-09	1
ω_{17}	-0.38313	-5.30636e-13	1	-0.38313	3.35051e-10	1
ω_{18}	0.38293	4.13676e-12	1	0.38293	6.90660e-10	1
ω_{19}	-0.40009	3.25850e-11	1	-0.4001	-3.23525e-11	1
ω_{20}	0.40553	1.58123e-12	1	0.3999	4.91744e-10	1

Table 4.8.: Valeurs propres et signatures de Krein pour le vortex central en 2D, calculées avec le code parallèle, avec et sans adaptation de maillage.

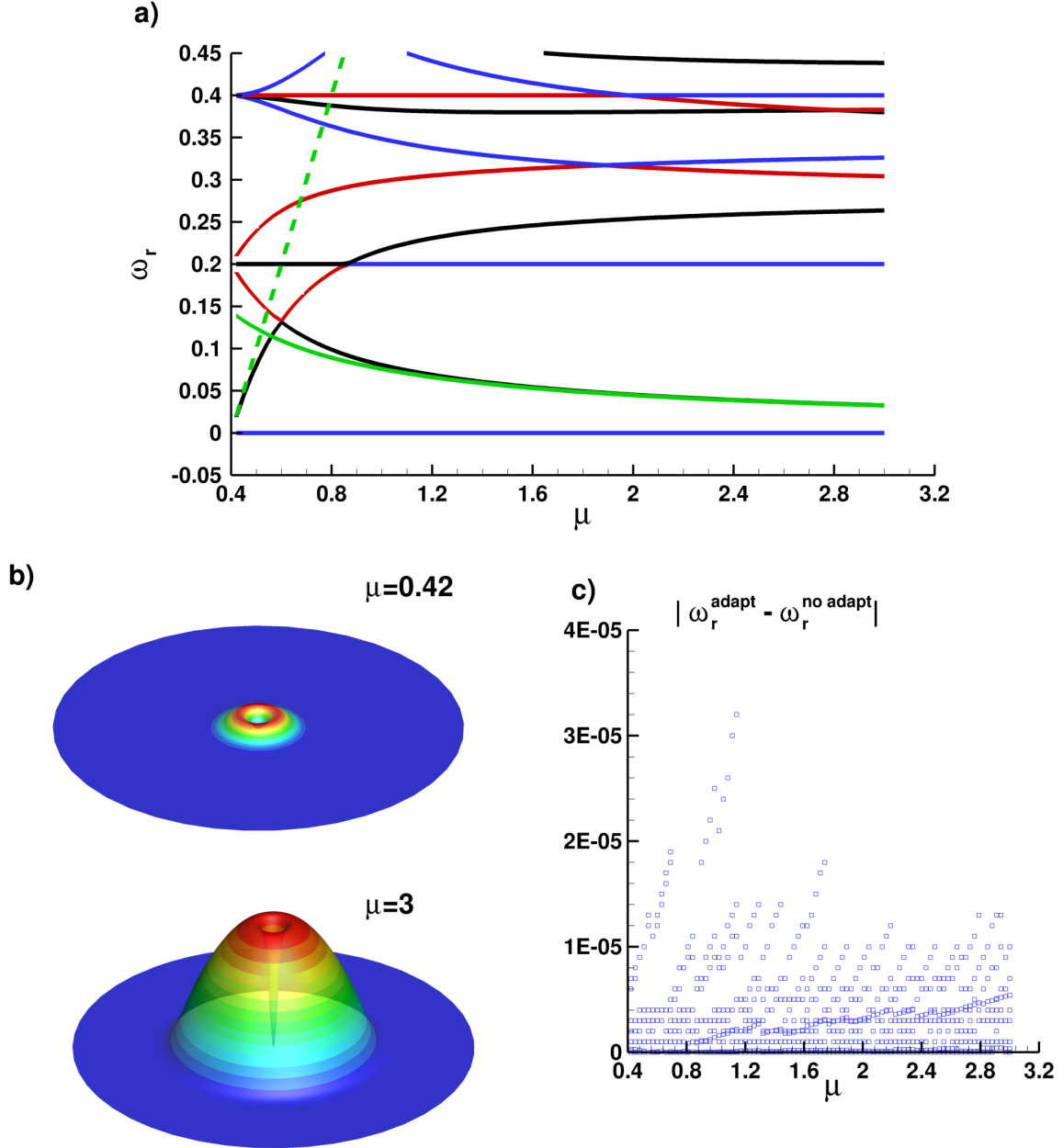
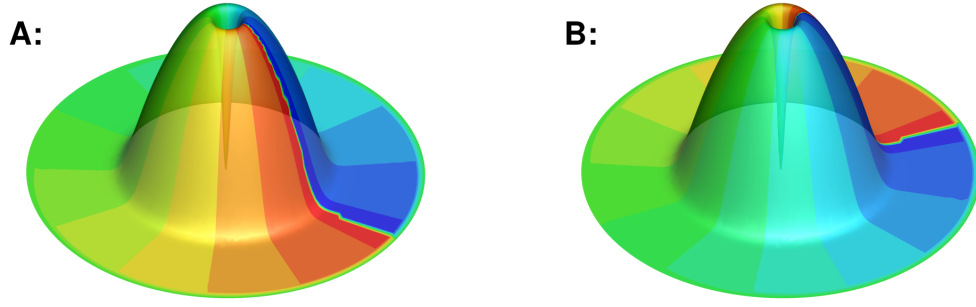


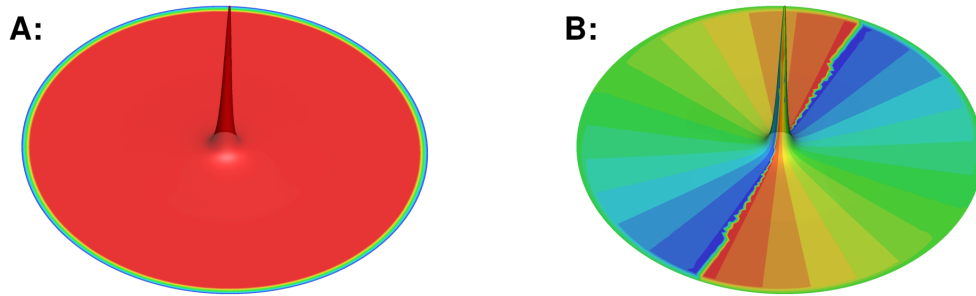
Figure 4.3.: Vortex central dans un condensat 2D: partie réelle ω_r des valeurs propres en fonction de μ , b) densité pour $\mu = 0.42$ et $\mu = 3$, c) Différences entre les parties réelles des 20 premières valeurs propres calculées avec et sans adaptation de maillage.

Ces deux derniers modes sont représentés en vert dans la figure 4.3a, le premier en trait plein, le second en pointillé. On observe un bon accord entre les résultats numériques et les deux prédictions. En 4.3b, on peut voir la densité $|\phi|^2$ au début et à la fin de la continuation. Le nombre d'atomes est passé de $N = 1.28$ pour $\mu = 0.42$ à $N = 688$ pour $\mu = 3$. La différence entre les 20 premières valeurs propres avec et sans adaptation de maillage est calculée et affichée dans la figure 4.3c. L'erreur est de l'ordre de 10^{-5} . Si l'on calcule plus de valeurs propres, elle augmente jusqu'à atteindre 10^{-3} pour ω_{100} . Les vecteurs propres associés aux premiers modes sont affichés en figure 4.4.

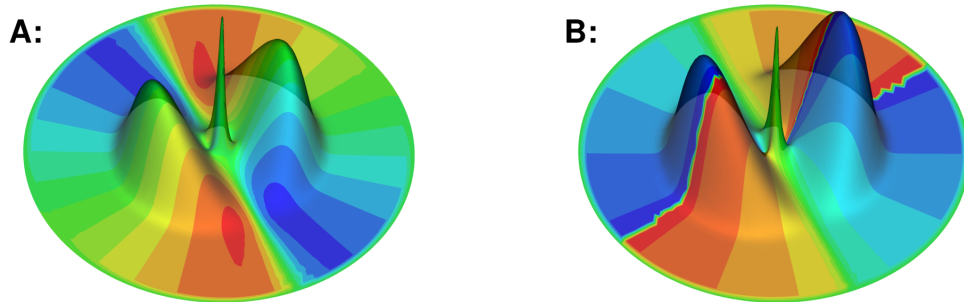
a) Mode d'invariance de phase



b) Mode anormal



c) Mode de Kohn



d) Mode $\mu-2\omega_{\perp}$

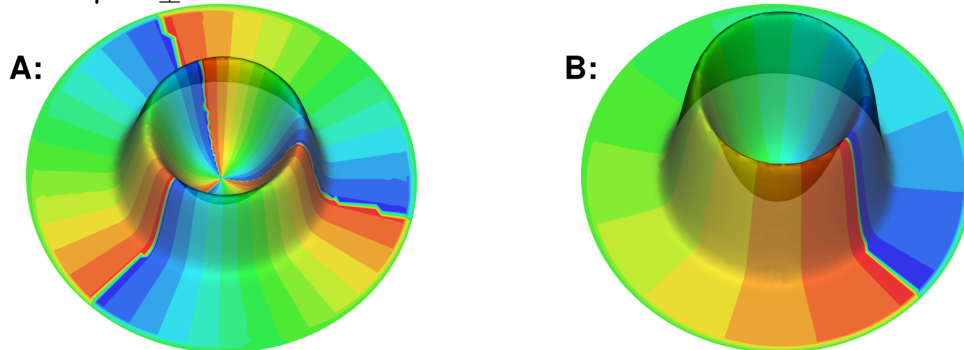


Figure 4.4.: Vecteurs propres pour les quatre premiers modes du vortex central: densité (en élévation) et phase (en couleur).

4.5.6. Soliton à partir de la limite linéaire

Un deuxième test avec continuation en 2D est un état instable, où l'on va chercher à obtenir des valeurs propres ayant une partie imaginaire non nulle. Le plus simple des états possibles est le soliton noir. La solution initiale est l'état $|1, 0\rangle$ en coordonnées cartésiennes:

$$\phi_{DS} = \sqrt{\frac{\omega_{\perp}}{2\pi}} H_0(\sqrt{\omega_{\perp}}x) H_1(\sqrt{\omega_{\perp}}y) e^{-\frac{1}{2}\omega_{\perp}(x^2+y^2)}. \quad (4.57)$$

Le potentiel chimique associé est $\mu_{DS} = 0.4$ et on prend $\mu = 1.03 \mu_{DS}$. L'état final pour $\mu = 3.007$ et le maillage associé sont présentés en figure 4.5c et 4.5d. Les spectres des valeurs propres sont affichées en figure 4.5a et 4.5b. On retrouve bien les valeurs complexes obtenues par [Middelkamp et al. \(2010b\)](#).

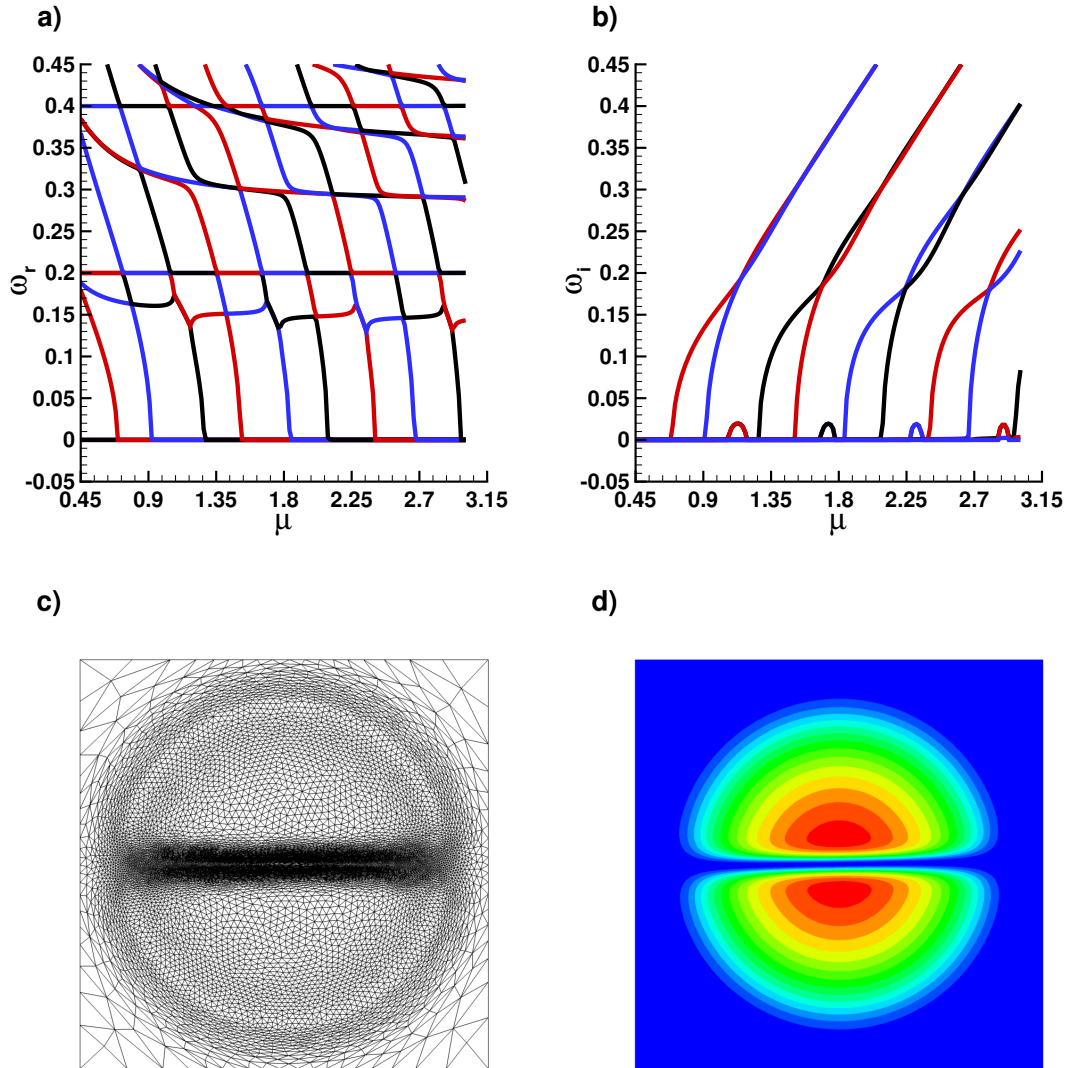


Figure 4.5.: Soliton noir dans un condensat 2D: a) partie réelle ω_r b) partie imaginaire ω_i des valeurs propres en fonction de μ , c) maillage adapté et d) densité $|\phi|^2$ pour $\mu = 3.007$.

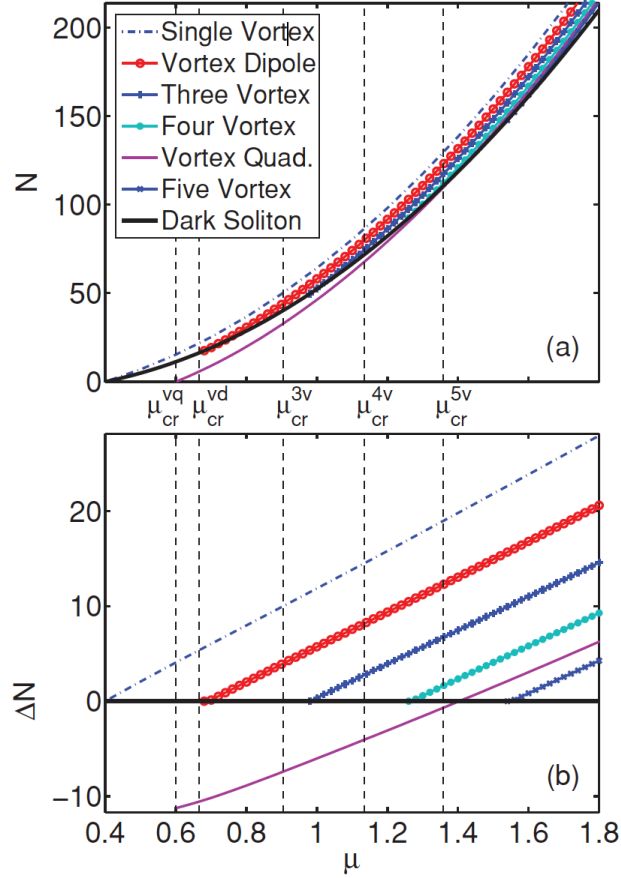


Figure 4.6.: Exemple de bifurcations à partir de la branche du soliton. En haut, nombre d'atomes en fonction du potentiel chimique pour les différents états bifurquant du soliton noir. En bas, différence de nombre d'atomes entre ces nouvelles branches et celle du soliton. Image issue de [Middelkamp et al. \(2010b\)](#).

On observe ici un comportement différent de l'adaptation de maillage par rapport aux exemples précédents. En effet, le soliton ne présente pas de symétrie azimutale. En discrétisant l'espace, on crée alors une direction favorisée le long de laquelle il va s'aligner. Lorsque le maillage varie, cette direction change et le soliton va alors tourner pour s'aligner sur cette nouvelle direction. La rotation complique la convergence de la méthode de Newton en augmentant le nombre d'itérations nécessaires. Afin de profiter des avantages de l'adaptation tout en minimisant les effets dus à la rotation, nous n'adaptions ici le maillage que toutes les cinq itérations lors de la continuation.

Pour mieux comprendre le spectre, il faut s'intéresser aux différents types d'instabilités pouvant exister dans les condensats. Le phénomène le plus important est la présence de bifurcations menant à de nouveaux états. En haut de la figure 4.6, on observe le nombre d'atomes N en fonction du potentiel chimique. A partir de la limite linéaire à $\mu = 0.4$, deux branches de solutions différentes correspondant aux états comprenant un vortex central et un soliton existent. De nouvelles branches se séparent ensuite de celle du soliton. Elles correspondent à des états comprenant 2, 3, 4 puis 5 vortex. La bifurcation est également visible sur la figure du bas: on voit que ces nouveaux états sont associés à un nombre d'atomes plus élevé. Les bifurcations donnant naissance à de nouvelles branches de solutions ont lieu lorsqu'une valeur propre réelle diminue jusqu'à devenir nulle. Elle se transforme alors en valeur imaginaire créant une instabilité vers ce nouvel état.

Un deuxième type d'instabilité apparaît lorsque deux modes de signatures de Krein opposées entrent en collision. Il n'y a ici qu'un mode de signature négative, il est en bleu à la limite linéaire où il bifurque du mode de Kohn (constant avec $\omega_r = \omega_\perp = 0.2$). Entre $\mu = 1.1$ et $\mu = 1.3$, il entre en collision (et fusionne) avec un mode diminuant rapidement et de signature de Krein positive. On observe alors l'apparition d'une petite instabilité sur le graphe des parties imaginaires des valeurs propres.

4.5.7. État fondamental en 3D

Après les différents cas tests en 2D, nous pouvons passer aux situations en 3D en commençant de nouveau par l'état fondamental pour un condensat sphérique, obtenu à partir de la limite linéaire par des polynômes d'Hermite (comme pour l'équation (4.57)). Les valeurs propres, pour μ de 1.5 à 3 et $\omega_\perp = \omega_z = 1$, sont affichées en figure 4.7a. On est ici limité par les capacités du code séquentiel. Pour étudier d'autres états 3D, ou simplement augmenter la valeur de μ , il est nécessaire d'utiliser le code parallèle. Les valeurs propres ont été calculées dans la limite de Thomas-Fermi par [Stringari \(1996\)](#) et [Kevrekidis and Pelinovsky \(2010\)](#):

$$\omega_{l,k}^{TF} = \omega_\perp \sqrt{l + 3k + 2kl + 2k^2}. \quad (4.58)$$

On observe plusieurs types de vecteurs propres, dont certains sont affichés en figure 4.7b.

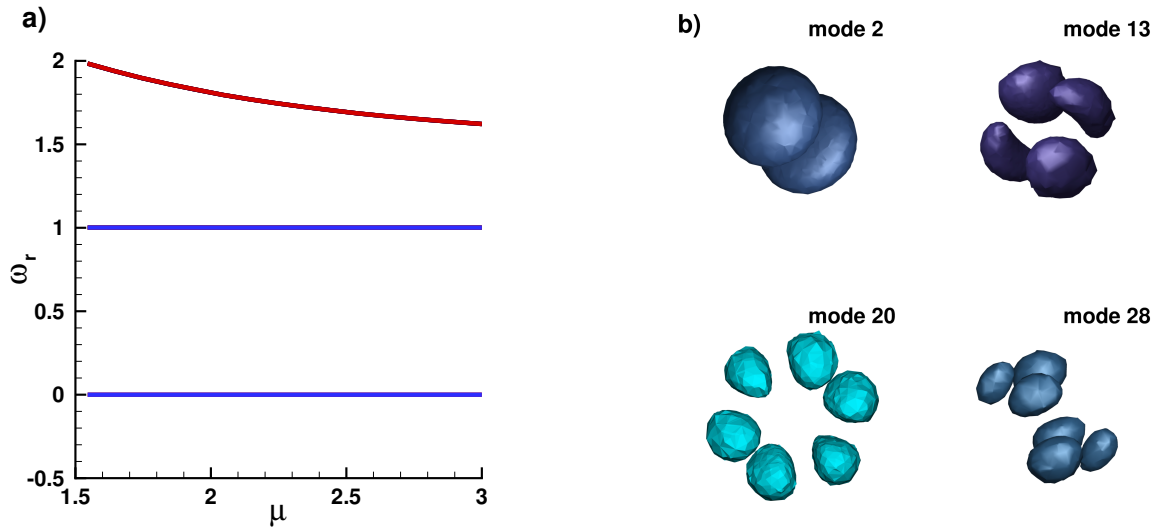


Figure 4.7.: Etat fondamental d'un condensat 3D: a) partie réelle ω_r des valeurs propres en fonction de μ , b) $|A|^2$ pour différents vecteurs propres.

4.5.8. Soliton noir en 3D

Un exemple de cas 3D simulé avec le code parallèle est le soliton noir. Il est créé dans la limite linéaire de la même façon que dans la section 4.5.6 (en ajoutant un polynôme de Hermite dans la direction z). En utilisant la symétrie azimutale de cet état, il est possible de transformer la recherche de l'état stationnaire et le problème aux valeurs propres en un problème en deux dimensions en coordonnées (r, z) grâce à une transformation de Fourier-Hankel. C'est ce qui a été fait par [Bisset et al. \(2015a\)](#). Les résultats obtenus par le calcul en trois dimensions et affichés en

figure 4.8 correspondent à ceux donnés par la référence. Le temps de calcul est de 4310 secondes sur 12 coeurs, ce qui est très raisonnable. Cela s'explique par l'efficacité de l'adaptation de maillage qui a permis de réduire la taille du problème avec un maillage de 12510 tétraèdres, soit 36622 degrés de libertés. On retrouve le phénomène observé dans le tableau 4.8: les premières valeurs propres qui doivent être 0 sont trouvées avec une précision plus faible qu'avec le code séquentiel. Cela se voit sur la figure 4.8a où les parties imaginaires de ces valeurs propres sont de l'ordre de $4e - 3$. Bien que cela soit suffisant pour observer les différentes instabilités possibles pour cet état, il serait intéressant d'améliorer cet aspect.

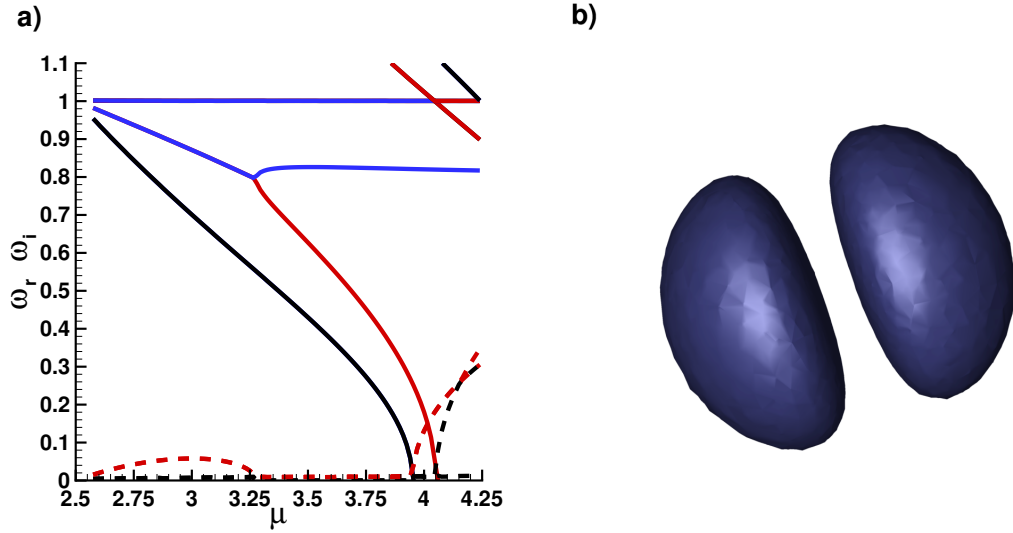


Figure 4.8.: Soliton noir en 3D: a) spectre des valeurs propres (parties réelles en traits pleins et parties imaginaires en pointillés) et b) isosurface de densité de la solution finale.

4.6. Résultats numériques pour deux composantes

Pour tester le code deux composantes, nous reproduisons les résultats de [Danaila et al. \(2016\)](#) qui ont également été obtenus par un code éléments finis utilisant FreeFem++. Le but de cet article était l'étude de structures dites anti-sombre où les composantes coexistent dans le domaine complet mais où des structures (solitons, vortex, etc.) font varier localement les densités. Dans les systèmes à deux composantes, une condition de miscibilité permettant la coexistence des deux espèces au même endroit est donnée (en l'absence de potentiel) par [Pitaevskii and Stringari \(2003\)](#):

$$g_{12} < \sqrt{g_{11}g_{22}}. \quad (4.59)$$

L'article de référence présente des expériences réalisées en utilisant des états hyperfins du rubidium ^{87}Rb montrant la possibilité de réaliser expérimentalement des structures anti-sombres. Dans le rubidium, on a $g_{11} \approx g_{22} \approx g_{12}$, ce qui situe les résultats expérimentaux proche de la limite de miscibilité. Numériquement, le paramètre g_{12} est varié afin d'étudier l'existence de la structure dans différents régimes d'interactions mutuelles.

Un autre cas test est donné par [Charalampidis et al. \(2020\)](#) et consiste en l'étude d'une bande de soliton sombre-claire (c'est à dire que les composantes existent dans des domaines séparés) et de ses bifurcations à partir de la limite linéaire.

4.6.1. État noir - anti-noir en 1D

Le premier cas est un état noir - anti-noir en 1D. La continuation est ici faite sur l'interaction entre les deux composantes. On a $\beta_{11} = \beta_{22} = 1$ et $\beta_{12} = \beta_{21}$ est varié de 0 à 1. La solution initiale est obtenue en introduisant un soliton noir dans une composante alors que la deuxième est placée dans l'état fondamental via la densité de Thomas-Fermi. Le potentiel harmonique est caractérisé par $\omega_z = 0.025$. On retrouve en figure 4.9 les parties réelles et imaginaires des valeurs propres.

Le mode anormal a pour $\beta_{12} = 0$ la fréquence $\frac{\omega_z}{\sqrt{2}} \approx 0.017$ et correspond à la ligne noire la plus basse sur le graphe des parties réelles. La faible instabilité apparaissant pour $0.71 < \beta_{12} < 0.87$ (voir figure 4.9b) causée par la collision de ce mode anormal avec un autre mode de signature de Krein positive. Les profils de densité en bas de la figure montrent que l'interaction entre les composantes est bien répulsive: la deuxième composante tend à se concentrer dans la zone de faible densité $|\phi_1|^2$ créée par le soliton dans la première composante, tout en coexistant avec dans le reste du domaine. On observe deux types de modes. Les premiers restent constants et ne dépendent pas de g_{12} , les seconds diminuent à mesure que l'interaction augmente.

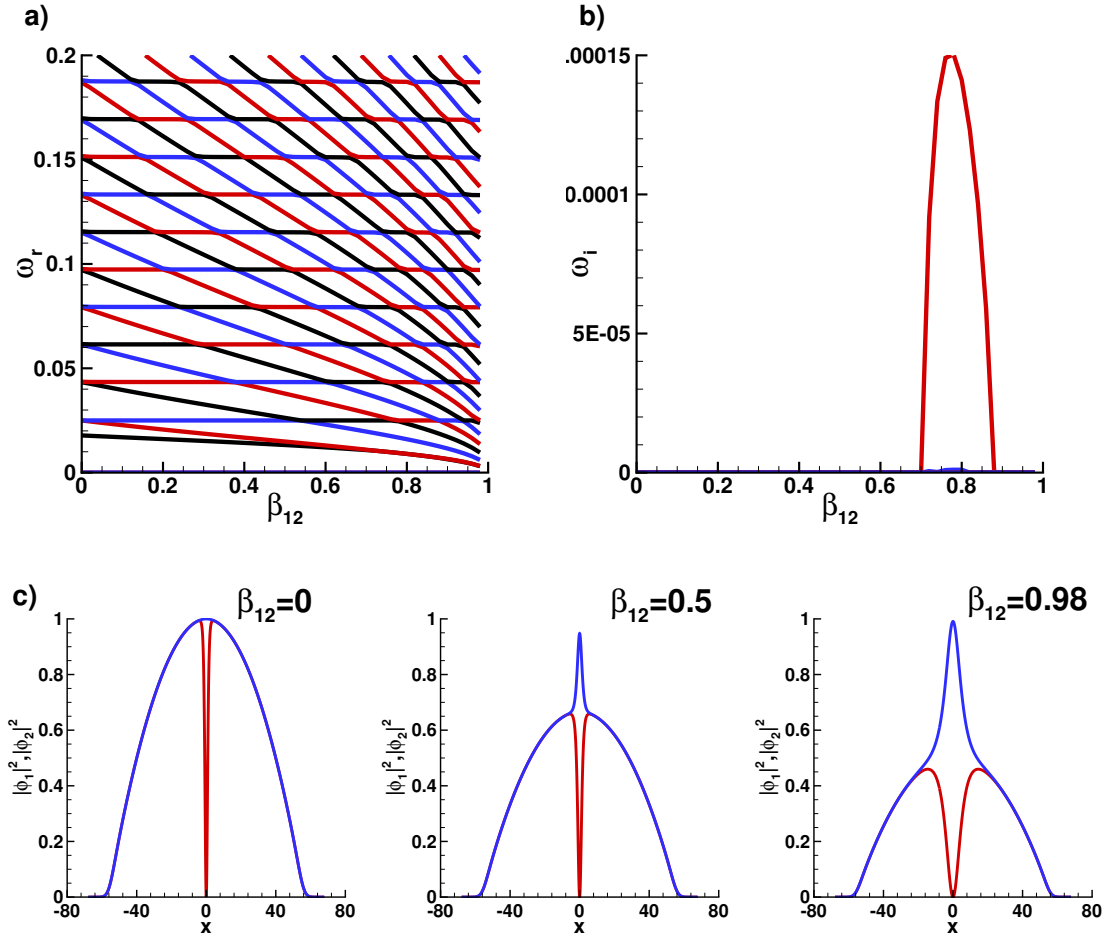


Figure 4.9.: État noir - anti-noir en 1D: a) partie réelle ω_r et b) partie imaginaire ω_i des valeurs propres, c) profils de densité pour trois valeurs de β_{12} ($|\phi_1|^2$ en rouge et $|\phi_2|^2$ en bleu).

4.6.2. État vortex - vortex anti-noir en 2D

Le deuxième test, toujours inspiré par [Danaila et al. \(2016\)](#), est un état vortex - vortex anti-noir en deux dimensions. Un vortex est présent au centre du condensat dans la première composante. On retrouve une nouvelle fois les résultats attendus en figure 4.10. Pour $\beta_{12} = 0$, les valeurs propres correspondent à la superposition de celles associées à l'état fondamental 2D et de celles d'un vortex en 2D. Le mode anormal à dans cette limite la fréquence $\frac{\omega_{\perp}^2}{2\mu} \log(2\sqrt{2}\pi \frac{\mu}{\omega_{\perp}}) \approx 0.044$. Il diminue très lentement lorsque β_{12} augmente mais sans croiser d'autres modes, ce qui explique l'absence d'instabilités ici. Pour les autres modes, on retrouve le même comportement que précédemment avec des valeurs constantes et d'autres diminuant. L'état disparaît vers $\beta_{12} \approx 0.94$, donc il ne peut pas être suivi jusqu'à la limite d'immiscibilité.

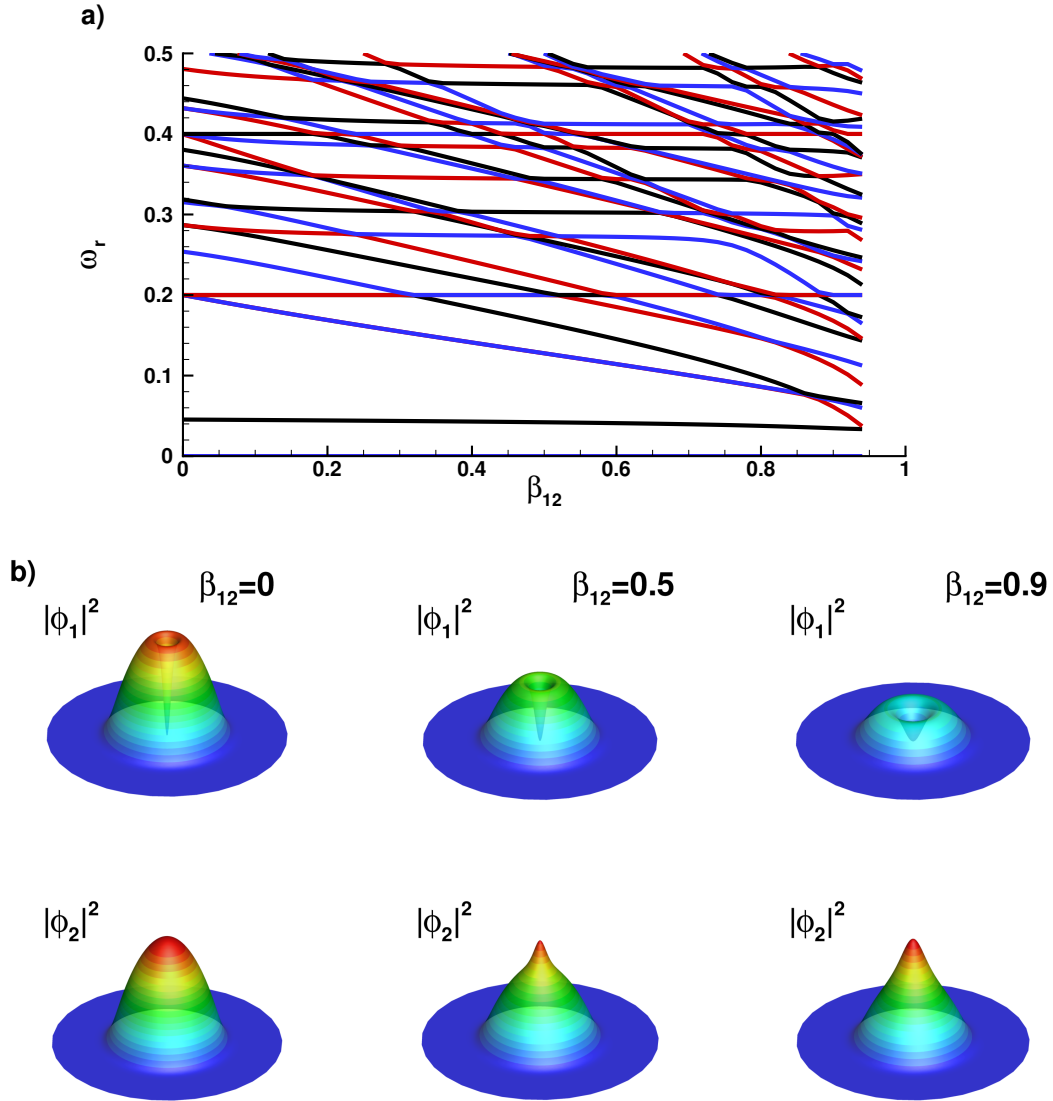


Figure 4.10.: État vortex - vortex anti-noir en 2D: a) partie réelle ω_r des valeurs propres, b) profils de densité pour trois valeurs de β_{12} .

4.6.3. État anneau de vortex - anneau de vortex anti-noir en 2D

Le dernier cas test présenté par [Danaila et al. \(2016\)](#) est un état où la première composante contient un soliton noir en anneau alors que la seconde est dans l'état fondamental. Le soliton en anneau est un état instable, mais on peut voir en figure 4.11 que la présence de la deuxième composante le stabilise puisque les parties imaginaires des valeurs propres diminuent lorsque l'interaction augmente. On observe qu'au fur et à mesure de cette augmentation, le nombre d'atomes dans la première composante diminue fortement jusqu'à ce qu'elle disparaisse presque complètement autour de $\beta_{12} \approx 0.92$ où l'état se termine. Un tel comportement existe aussi (mais plus faiblement) pour la configuration vortex - vortex anti-noir.

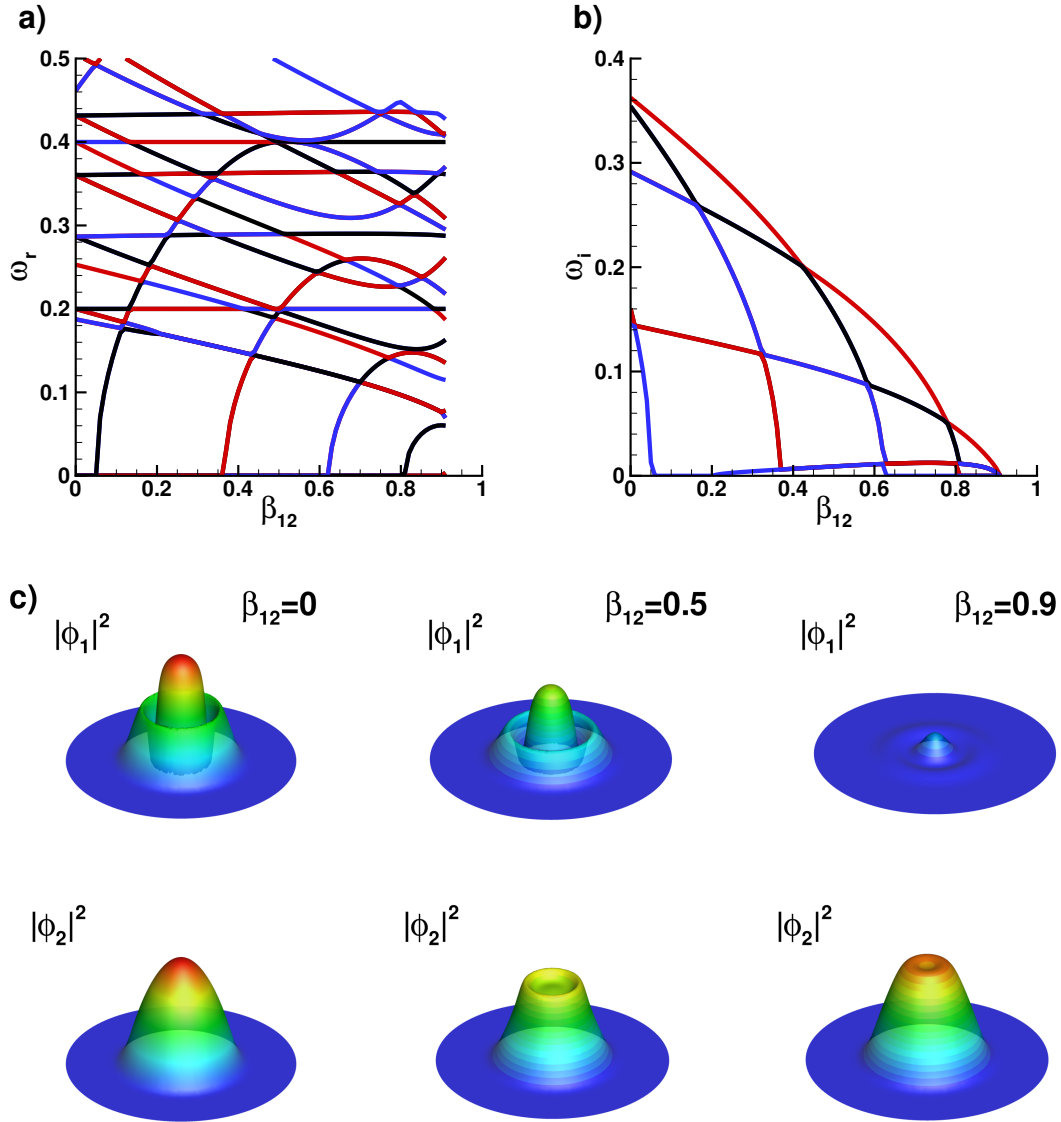


Figure 4.11.: État anneau de vortex - anneau de vortex anti-noir: a) partie réelle ω_r et b) partie imaginaire ω_i des valeurs propres, c) profils de densité pour différentes valeurs de β_{12} .

4.6.4. Bande de soliton noir-claire à partir de la limite linéaire

Ce dernier cas test est effectué avec le code parallèle. Le but est de reproduire les résultats obtenus par [Charalampidis et al. \(2020\)](#) concernant une bande de soliton noir-claire. Il s'agit d'un état où la première composante est dans l'état fondamental et la seconde contient un soliton noir. L'interaction va alors séparer les deux composantes en comprimant la première dans l'espace libre du soliton. L'état est construit à partir de la limite linéaire de la façon suivante:

- On commence par chercher l'état fondamental pour la première composante avec $\mu_1 = 1$, $\omega_\perp = 0.2$ et $\beta_{11} = 1.03$.
- On résout ensuite l'équation de Schrödinger (4.21). Les quatre premières solutions obtenues sont présentées en figure 4.12a. C'est la seconde, associée au potentiel chimique $\mu_2 = 1.04133$ qui est sélectionnée.
- Il ne reste plus qu'à résoudre le système complet en faisant une continuation sur μ_2 . Nous suivons l'état jusqu'à $\mu_2 = 1.32$. La constante non-linéaire pour la deuxième composante est fixée à $\beta_{22} = 0.97$.

L'évolution du nombre d'atomes total est affichée en figure 4.12b. On retrouve en figure 4.13d les valeurs propres données par le code BdG. En plus d'une petite instabilité pour $1.07 < \mu_2 < 1.13$ due à la collision entre deux modes, on observe l'apparition de deux branches instables vers $\mu_2 = 1.13$ et $\mu_2 = 1.24$. Il s'agit de bifurcations en fourche vers des états comprenant deux et trois vortex à la place du soliton. [Charalampidis et al. \(2020\)](#) a étudié ces branches en utilisant une continuation avec déflation permettant de trouver les solutions associées dès l'apparition de la branche. En l'absence de cette technique, nous utilisons les vecteurs propres de BdG pour obtenir les nouvelles branches. Pour ce faire, nous sélectionnons un vecteur propre $(A, B, C, D)^T$ associé à une valeur propre imaginaire sur la branche étudiée. Puis nous utilisons:

$$\phi'_1 = \phi_1 + \epsilon(A + \overline{B}), \quad \phi'_1 = \phi_1 + \epsilon(C + \overline{D}), \quad (4.60)$$

comme solution initiale pour la méthode de Newton avec ϵ un paramètre à ajuster à la main pour que le code converge vers la solution recherchée. Les deux branches sont suivies par continuation et les valeurs propres sont affichées en figure 4.13d. Les points bleus correspondent aux résultats de [Charalampidis et al. \(2020\)](#) et les points rouges sont celles données par notre code. On voit que les résultats coïncident à l'exception d'un mode imaginaire pour les faibles valeurs de μ_2 de la branche ayant trois vortex. Ce mode disparaissant rapidement, il s'agit probablement d'un artefact numérique. Le nombre d'atomes total pour les deux branches est affiché en figure 4.12b.

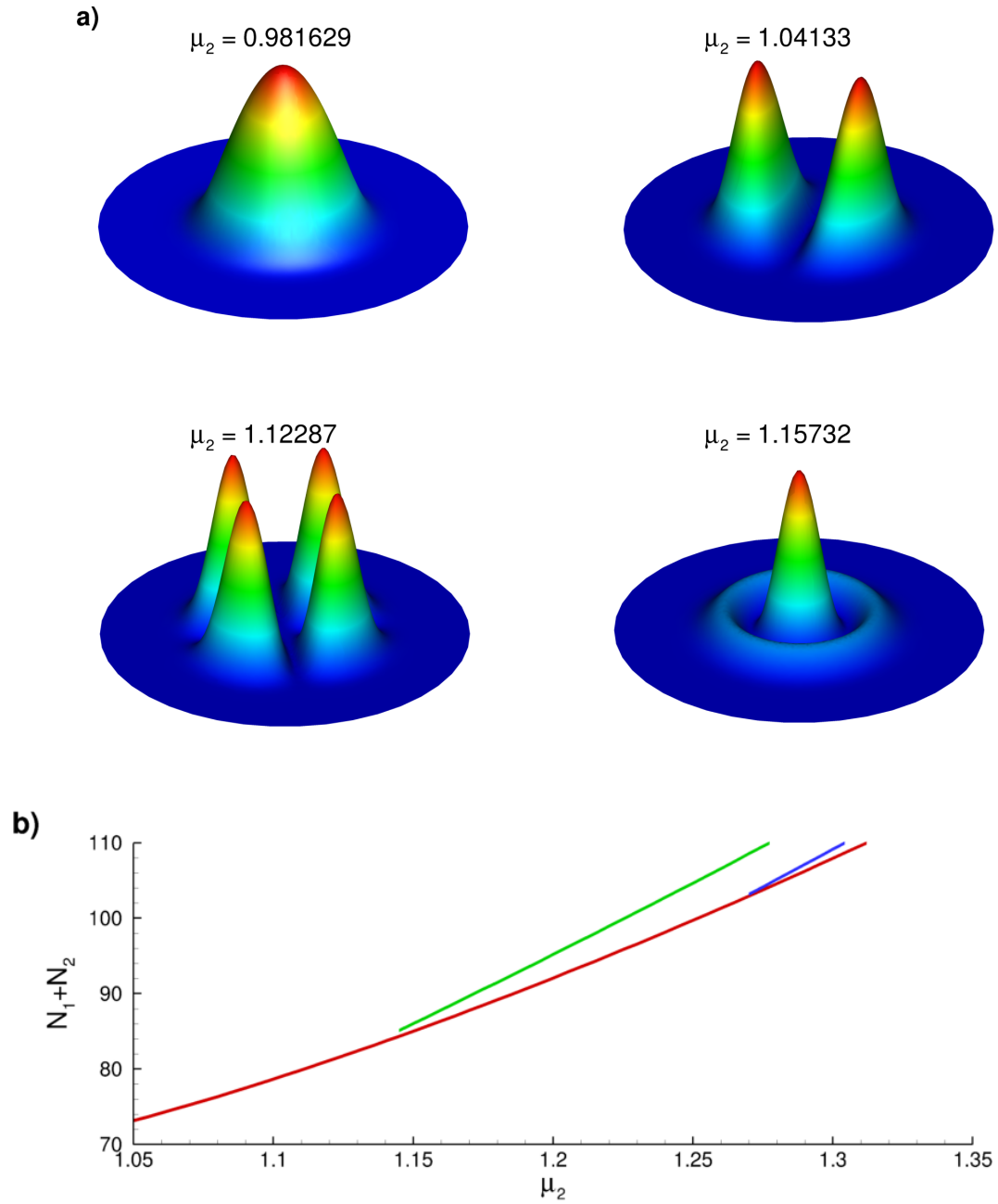


Figure 4.12.: Bande de soliton noir-claire: a) premiers états pour la deuxième composante dans la limite linéaire, b) évolution du nombre d'atomes total au cours de la continuation pour les différentes branches: soliton en rouge, états avec deux et trois vortex en vert et bleu.

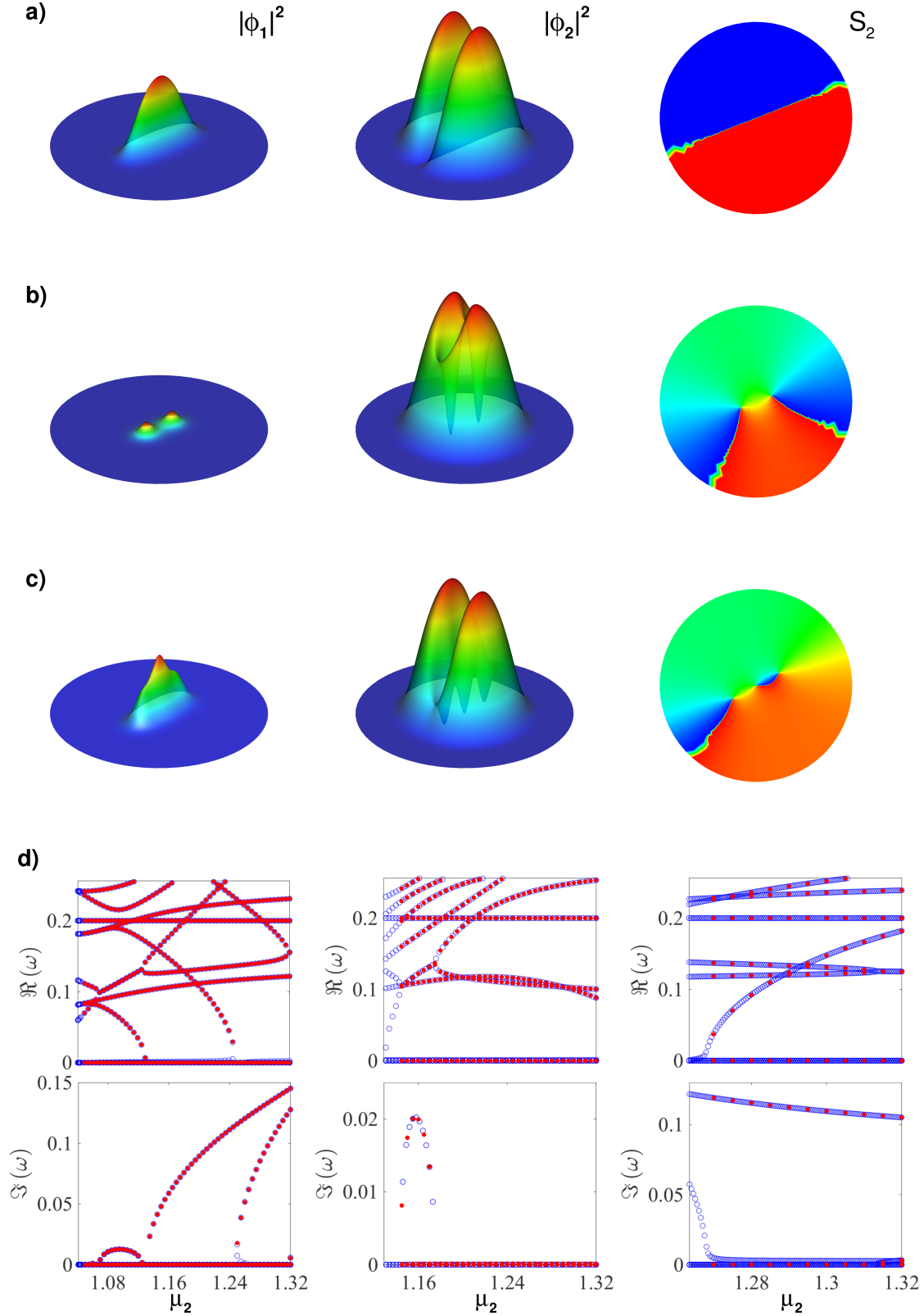


Figure 4.13.: Bande de soliton noir-claire: densités et phases de la deuxième composante pour $\mu_2 = 1.32$ dans le cas a) du soliton, b) du dipôle de vortex, c) de l'état à trois vortex, d) parties réelles et imaginaires des valeurs propres pour les trois branches. Les points bleus sont les résultats de Charalampidis et al. (2020) et les points rouges ceux de notre code parallèle.

5. Couplage des équations de Navier-Stokes et Gross-Pitaevskii pour la friction mutuelle

Le travail présenté dans cette section porte sur la mise au point théorique et la validation numérique d'un modèle d'hélium superfluide couplant les équations de Navier-Stokes et de Gross-Pitaevskii. Il va faire l'objet d'un article qui sera soumis: Marc Brachet, Zhentong Zhang, Georges Sadaka, Victor Kalt, Ionut Danaila, *Coupling Navier-Stokes and Gross-Pitaevskii equations for the simulation of two-fluid quantum flows*.

L'organisation de ce chapitre est la suivante: nous commençons par présenter dans la section 5.1 les modèles HVBK et de filaments de vortex qui sont utilisés pour l'étude de la friction mutuelle. Les différentes étapes de mise au point de notre modèle sont présentées en section 5.2. Des informations sur les méthodes numériques utilisées (algorithme d'avancement en temps, adimensionnement) sont données en section 5.3. Enfin, les tests de validation et les résultats obtenus sont présentés en section 5.4.

5.1. Modélisation de l'hélium superfluide

5.1.1. Le modèle HVBK

Parmi les nombreux modèles décrivant l'hélium superfluide, un des plus utilisé est celui de Hall-Vinen-Bekharevich-Khalatnikov (HVBK). Sa base est le modèle à deux fluides de Tisza et Landau représentant un mélange de superfluide et de fluide normal en couplant une équation d'Euler et une équation de Navier-Stokes. En utilisant les indices "s" pour la fraction superfluide et "n" pour la fraction normale, le modèle HVBK incompressible s'écrit:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_n = 0, \quad (5.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_s = 0, \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_n}{\partial t} + \mathbf{v}_n \cdot \nabla \mathbf{v}_n = -\frac{1}{\rho_n} \nabla p_n + \frac{1}{\rho_n} \mathbf{F}_{ns} + \nu_n \nabla^2 \mathbf{v}_n, \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial t} + \mathbf{v}_s \cdot \nabla \mathbf{v}_s = -\frac{1}{\rho_s} \nabla p_s - \frac{1}{\rho_s} \mathbf{F}_{ns}, \quad (5.4)$$

avec p_n et p_s les pressions, $\mathbf{v}_n$ et $\mathbf{v}_s$ les vitesses et ν_n la viscosité. Ces deux fluides n'interagissent pas directement, mais à travers les vortex quantiques du superfluide. Le couplage entre les équations dépend alors d'une force de friction entre les vortex et le fluide normal $\mathbf{F}_{ns}$. En considérant des grandeurs moyennées à une échelle supérieure à la distance inter-vortex, Hall et Vinen donnent l'expression suivante (Hall et al., 1956a):

$$\mathbf{F}_{ns} = -\frac{B}{2} \frac{\rho_n \rho_s}{\rho} \frac{\boldsymbol{\omega}_s \times (\boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n))}{|\boldsymbol{\omega}_s|} - \frac{B'}{2} \frac{\rho_n \rho_s}{\rho} \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{v}_s - \mathbf{v}_n). \quad (5.5)$$

5.1.2. Le modèle des filaments de vortex

Une autre approche est celle proposée par [Schwarz \(1985\)](#). Elle consiste à remplacer l'étude du superfluide par celle de lignes de vortex paramétrisées par $\mathbf{s}(\sigma, t)$, où σ est l'abscisse curviligne. La vorticit  superfluide est singul re le long de la ligne:

$$\boldsymbol{\omega}_s = \kappa \oint_{\mathcal{L}} \mathbf{s}'(\sigma, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{s}(\sigma, t)) d\sigma, \quad (5.6)$$

avec $\mathbf{s}'(\sigma, t) = \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial \sigma}(\sigma, t)$ la tangente   la ligne de vortex. L'int grale porte sur l'ensemble des lignes de vortex. A partir de la formule pr c dente, on peut exprimer la vitesse superfluide par une loi de Biot-Savart:

$$\mathbf{v}_s = \frac{\kappa}{4\pi} \oint_{\mathcal{L}} \frac{(\mathbf{s}(\sigma, t) - \mathbf{x}) \times \mathbf{s}'(\sigma, t)}{|\mathbf{s}(\sigma, t) - \mathbf{x}|^3} d\sigma + \mathbf{v}_{s,ext}. \quad (5.7)$$

$\mathbf{v}_{s,ext}$ repr sente une contribution   la vitesse superfluide ind pendante des vortex. Cela peut correspondre   l'influence des conditions limites ainsi qu'  l'application d'une vitesse externe. D'un point de vue num rique, l'expression (5.7) pose probl me   cause de la singularit  le long de la ligne de vortex. Si l'on consid re une ligne discr tis e en une succession de segments, Schwarz a propos  de s parer l'int grale en un terme local, repr sentant la contribution majoritaire, et un terme non-local associ  aux autres lignes de vortex. On obtient ainsi l'expression suivante pour la vitesse superfluide au point $\mathbf{s}_k$:

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{s}_k) = \frac{\kappa}{4\pi} \mathbf{s}'_k \times \mathbf{s}''_k \ln \left(\frac{2\sqrt{l_+ l_-}}{ae^{1/4}} \right) + \frac{\kappa}{4\pi} \oint_{\mathcal{L}'} \frac{(\mathbf{s}(\sigma, t) - \mathbf{x}) \times \mathbf{s}'(\sigma, t)}{|\mathbf{s}(\sigma, t) - \mathbf{x}|^3} d\sigma. \quad (5.8)$$

l_+ et l_- sont les longueurs des deux segments li s au point $\mathbf{s}_k$ dans la discr tisation de la ligne. $\mathbf{s}'_k$ et $\mathbf{s}''_k$ sont respectivement les tangentes et normales   la courbe en $\mathbf{s}_k$. a est une approximation du rayon du vortex. L'approximation LIA (Localized Induction Approximation) consiste   ne consid rer que le premier terme et   n gliger les contributions non-locales. Pour obtenir la dynamique compl te de l'h lium, il est cependant n cessaire de consid rer les contributions non-locales les plus importantes ([Adachi et al., 2010](#)). Dans ce cas, des algorithmes bas s sur des arbres quaternaires ont  t  utilis s pour  viter de prendre en compte la contribution des vortex les plus  loign s lors du calcul de l'int grale ([Baggaley and Barenghi, 2011](#); [H nninen and Baggaley, 2014](#)). Cela permet, pour une discr tisation des vortex en $\mathcal{N}$ points d'obtenir un nombre d'op rations en $\mathcal{O}(\mathcal{N} \log(\mathcal{N}))$ au lieu de $\mathcal{O}(\mathcal{N}^2)$ pour le calcul complet (et $\mathcal{O}(\mathcal{N})$ avec la LIA).

Des algorithmes couplant la m thode des filaments de vortex avec une  quation de Navier-Stokes ([Galantucci et al., 2020](#)) ou une m thode de Boltzmann sur r seau ([Inui and Tsubota, 2021](#)) pour le fluide classique ont  t  propos s afin de simuler les deux composantes de l'h lium superfluide. Dans les deux cas, la vitesse de la ligne est donn e par:

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} = \mathbf{v}_s + \alpha \mathbf{s}' \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s) + \alpha' \mathbf{s}' \times (\mathbf{s}' \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s)). \quad (5.9)$$

Les coefficients α et α' sont li s aux coefficients B et B' de l' quation (5.5). Cette expression a  t  propos e par Schwarz d s 1978 dans le cas de la LIA ([Schwarz, 1978](#)). En n'ayant pas   simuler le superfluide, cette approche permet une prise en compte individuelle des vortex (sans la moyenne utilis e dans HVBK) et donc de r aliser des simulations   une  chelle relativement importante (une boite de 2 mm de hauteur pour [Inui and Tsubota \(2021\)](#)). Le principal inconv nient est que les filaments de vortex ne permettent pas de prendre en compte la nucl ation et les reconnections entre les lignes de vortex, qui doivent  tre r alis es de fa on ph nom nologique lorsque deux lignes sont proches. Une comparaison num rique de plusieurs m thodes de reconnections a  t  r alis e par [Baggaley \(2012\)](#). Les reconnections ont  t  observ es exp rimentalement dans l'h lium ([Bewley et al., 2008](#)).

5.2. Couplage entre les équations de Gross-Pitaevskii et de Navier-Stokes

Afin de pouvoir réaliser des simulations réaliste à petite échelle, il est nécessaire d'avoir un modèle complet du superfluide, et non juste des vortex. C'est pourquoi nous proposons une troisième approche dans laquelle la partie superfluide est modélisée par l'équation de Gross-Pitaevskii et le fluide normal par l'équation de Navier-Stokes. On a pour la fonction d'onde ψ associée au superfluide:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + g(|\psi|^2 - |\psi_0|^2)\psi, \quad (5.10)$$

Cette expression diffère de l'équation (2.12) par le terme $g|\psi_0|^2\psi$ avec $n_0 = |\psi_0|^2$ la densité d'un écoulement uniforme. Il s'agit d'un terme de potentiel constant qui ne modifie pas la dynamique du système (Nore et al., 1997). Cela revient à considérer l'énergie:

$$\mathcal{E} = \int \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{g}{2} (|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 - |\psi_0|^2)^2 \right) d\mathbf{x}. \quad (5.11)$$

Il faut noter qu'en l'absence de potentiel, l'équation de Gross-Pitaevskii conserve (en plus de la masse et de l'énergie) l'impulsion définie par:

$$\mathcal{P}_s = \int \frac{i\hbar}{2} (\psi \nabla \bar{\psi} - \bar{\psi} \nabla \psi) d\mathbf{x}. \quad (5.12)$$

Le fluide normal est décrit par l'équation de Navier-Stokes incompressible:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_n = 0, \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_n}{\partial t} + (\mathbf{v}_n \cdot \nabla) \mathbf{v}_n = -\frac{1}{\rho_n} \nabla p_n + \nu_n \nabla^2 \mathbf{v}_n. \quad (5.14)$$

Cette équation conserve trois quantités:

$$\mathcal{M}_n = \rho_n \int d\mathbf{x}, \quad \text{la masse}, \quad (5.15)$$

$$\mathcal{E}_n = \rho_n \int \frac{\mathbf{v}_n^2}{2} d\mathbf{x}, \quad \text{l'énergie}, \quad (5.16)$$

$$\mathcal{P}_n = \rho_n \int \mathbf{v} d\mathbf{x}, \quad \text{l'impulsion}. \quad (5.17)$$

La construction du modèle peut être séparée en trois parties:

1. Obtenir une formule donnant une vitesse superfluide non singulière (à la manière de l'équation (5.7)). Ce champ (noté $\mathbf{v}_s^{reg}$) doit donner la vitesse du vortex lorsqu'il est évalué sur la ligne.
2. Utiliser la vitesse régularisée pour évaluer la force de friction mutuelle.
3. Ajouter à l'équation de Gross-Pitaevskii un terme permettant la prise en compte du couplage.

5.2.1. Vitesse superfluide régularisée

La vitesse superfluide est donnée par la transformée de Madelung à partir de la phase S de la fonction d'onde et de la densité superfluide $\rho_s = |\psi|^2$:

$$\mathbf{v}_s(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\psi \nabla \bar{\psi} - \bar{\psi} \nabla \psi}{|\psi|^2}. \quad (5.18)$$

Pour obtenir un champ régulier, la première étape est de retirer la singularité à l'emplacement du vortex (où $|\psi|^2 = 0$) grâce à un paramètre de régularisation ϵ :

$$\mathbf{v}_s^\epsilon(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\psi \nabla \bar{\psi} - \bar{\psi} \nabla \psi}{|\psi|^2 + \epsilon^2 \bar{\varrho}_s}, \quad (5.19)$$

où $\bar{\varrho}_s = \langle |\psi|^2 \rangle$ est la valeur moyenne (dans l'espace) de la densité superfluide. On peut alors lisser ce champ en le convoluant avec une gaussienne de la façon suivante:

$$\mathbf{v}_s^{reg} = (1 + \epsilon^2) \mathcal{F}^{-1} \left(\exp \left(-\frac{\mathbf{k}^2}{k_{reg}^2} \right) \mathcal{F}(\mathbf{v}_s^\epsilon) \right). \quad (5.20)$$

Le facteur $(1 + \epsilon^2)$ est nécessaire pour obtenir la bonne circulation de la vitesse loin du vortex. k_{reg} est un paramètre à ajuster et contrôle l'échelle sur laquelle la vitesse est lissée. Cette étape de filtrage se retrouve également dans les modèles utilisant les filaments de vortex où il est nécessaire de répartir la force de friction calculée sur la ligne dans le fluide environnant. Les détails de cette procédure sont indiqués par [Galantucci et al. \(2020\)](#). ϵ permet de régulariser la vitesse avant le lissage afin d'éviter la divergence due à la nullité de la densité le long de la ligne. On peut évaluer l'effet du lissage en calculant la norme F^{-1} de la vorticit  superfluide:

$$F^{-1} = \frac{\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{\mathbf{k}^2}{k_{reg}^2} \right) d\mathbf{k} = \frac{\hbar}{2m} k_{reg}^2. \quad (5.21)$$

On peut alors consid rer que le champ $\hat{\omega}_s$ d fini par:

$$\hat{\omega}_s = F \nabla \times \mathbf{v}_s^{reg} = F \omega_s, \quad (5.22)$$

est tangent   la ligne avec une norme maximum proche de 1 sur la ligne de vortex et tend vers 0 loin des vortex. Il peut donc servir d' quivalent   la grandeur $\mathbf{s}'$ utilis e dans la section [5.1.2](#).

5.2.2. Calcul de la force de couplage

La force de couplage $\mathbf{F}_{ns}$ est cherch e sous la forme:

$$\mathbf{F}_{ns} = \rho_n B_\star \omega_s \times (\hat{\omega}_s \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_L)) + \rho_n B'_\star \omega_s \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_L), \quad (5.23)$$

avec $\mathbf{v}_L$ la vitesse de la ligne de vortex. Il y a donc, comme dans les expressions (5.5) et (5.9), une composante oppos e au d placement du vortex (force de friction) et une force perpendiculaire   la ligne et   ce d placement (force de Iordanskii). L' quation (5.23) lie le mouvement du vortex   celui du fluide normal. Pour coupler ce dernier avec le superfluide, il faut alors s'int resser   l'influence des vortex dans le superfluide. Du fait de la diff rence de vitesse entre les vortex et le superfluide, ils subissent une force de Magnus F_{md} dont l'expression est donn e par [Sonin \(1997\)](#):

$$\mathbf{F}_{md} = \rho_s (\mathbf{v}_L - \mathbf{v}_s) \times \omega_s, \quad (5.24)$$

Le bilan des forces s'exer ant sur le vortex s' crit:

$$\mathbf{F}_{ns} + \mathbf{F}_{md} = 0. \quad (5.25)$$

On cherche donc   r soudre:

$$\rho_n B_\star \omega_s \times (\hat{\omega}_s \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_L)) + \rho_n B'_\star \omega_s \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_L) - \rho_s \omega_s \times (\mathbf{v}_L - \mathbf{v}_s) = 0. \quad (5.26)$$

On peut alors d finir la vitesse de glissement des vortex par rapport au superfluide:

$$\mathbf{v}_{slip} = \mathbf{v}_L - \mathbf{v}_s. \quad (5.27)$$

En utilisant les équations (5.22) et (5.27), on obtient l'équation pour $\mathbf{v}_{\text{slip}}$:

$$\rho_n B_\star \boldsymbol{\omega}_s \times (F \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s^{\text{reg}} - \mathbf{v}_{\text{slip}})) + \rho_n B'_\star \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s^{\text{reg}} - \mathbf{v}_{\text{slip}}) - \rho_s \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{v}_{\text{slip}} = 0. \quad (5.28)$$

Pour simplifier les notations, on peut ici introduire le contre-courant $\mathbf{w} = \mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s^{\text{reg}}$. La vorticit  superfluide $\boldsymbol{\omega}_s$ est tangente   la ligne de vortex. Si l'on suppose que $\mathbf{w}$ et $\boldsymbol{\omega}_s$ ne sont pas parall les, on peut isoler la composante du contre-courant perpendiculaire au vortex:

$$\mathbf{w}_p = \mathbf{w} - \frac{\mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\omega}_s}{\boldsymbol{\omega}_s \cdot \boldsymbol{\omega}_s} \boldsymbol{\omega}_s. \quad (5.29)$$

On peut alors travailler dans la base $(\boldsymbol{\omega}_s, \mathbf{w}_p, \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p)$, ce qui donne:

$$\rho_n B_\star \boldsymbol{\omega}_s \times (F \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}})) + \rho_n B'_\star \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}}) - \rho_s \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{v}_{\text{slip}} = 0. \quad (5.30)$$

On peut alors rassembler les produits vectoriels:

$$\boldsymbol{\omega}_s \times (\rho_n B_\star (F \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}})) + \rho_n B'_\star (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}}) - \rho_s \mathbf{v}_{\text{slip}}) = 0. \quad (5.31)$$

Si l'on suppose $\mathbf{v}_{\text{slip}} \perp \boldsymbol{\omega}_s \Leftrightarrow \mathbf{v}_{\text{slip}} \cdot \boldsymbol{\omega}_s = 0$, alors on a  galement (par d finition de $\mathbf{w}_p$):

$$\boldsymbol{\omega}_s \cdot (\rho_n B_\star (F \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}})) + \rho_n B'_\star (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}}) - \rho_s \mathbf{v}_{\text{slip}}) = 0. \quad (5.32)$$

Ce qui implique que:

$$\rho_n B_\star (F \boldsymbol{\omega}_s \times (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}})) + \rho_n B'_\star (\mathbf{w}_p - \mathbf{v}_{\text{slip}}) - \rho_s \mathbf{v}_{\text{slip}} = 0. \quad (5.33)$$

On peut alors regrouper les termes en $\mathbf{v}_{\text{slip}}$:

$$(\rho_s + \rho_n B'_\star) \mathbf{v}_{\text{slip}} + \rho_n B_\star F \boldsymbol{\omega}_s \mathbf{v}_{\text{slip}} = \rho_n B_\star F \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p + \rho_n B'_\star \mathbf{w}_p, \quad (5.34)$$

puis chercher $\mathbf{v}_{\text{slip}}$ sous la forme:

$$\mathbf{v}_{\text{slip}} = U_\star \mathbf{w}_p + V_\star F \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p. \quad (5.35)$$

En rempla ant (5.35) dans (5.34), on obtient:

$$\begin{aligned} (\rho_s + \rho_n B'_\star)(U_\star \mathbf{w}_p + V_\star F \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p) + \rho_n B_\star F \boldsymbol{\omega}_s (U_\star \mathbf{w}_p + V_\star F \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p) \\ = \rho_n B_\star F \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p + \rho_n B'_\star \mathbf{w}_p. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Utiliser $\boldsymbol{\omega}_s \times (\boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p) = -|\boldsymbol{\omega}_s|^2 \mathbf{w}_p$ permet de s parer les termes en $\mathbf{w}_p$ de ceux en $\boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{w}_p$:

$$\begin{cases} (\rho_s + \rho_n B'_\star)U_\star - \rho_n B_\star F^2 |\boldsymbol{\omega}_s|^2 V_\star = \rho_n B'_\star, \\ \rho_n B_\star U_\star + (\rho_s + \rho_n B'_\star)V_\star = \rho_n B_\star. \end{cases} \quad (5.37)$$

On obtient finalement la solution du syst me:

$$U_\star = \frac{\rho_n (B_\star^2 F^2 |\boldsymbol{\omega}_s|^2 \rho_n + B'_\star (\rho_s + \rho_n B'_\star))}{B_\star^2 F^2 |\boldsymbol{\omega}_s|^2 \rho_n^2 + (\rho_s + \rho_n B'_\star)^2}, \quad (5.38)$$

$$V_\star = \frac{B_\star \rho_n \rho_s}{B_\star^2 F^2 |\boldsymbol{\omega}_s|^2 \rho_n^2 + (\rho_s + \rho_n B'_\star)^2}. \quad (5.39)$$

et la force est donc:

$$\boxed{\mathbf{F}_{ns} = \rho_s \boldsymbol{\omega}_s \times (U_\star \mathbf{w}_p + V_\star \hat{\boldsymbol{\omega}}_s \times \mathbf{w}_p)}. \quad (5.40)$$

5.2.3. Coefficients de friction

L'analyse dimensionnelle permet de vérifier que les coefficients $B_\star$, $B'_\star$, $U_\star$ et $V_\star$ sont sans dimensions. $\mathbf{F}_{ns}$ et $\mathbf{F}_{md}$ sont des forces volumiques.

- $[\mathbf{v}_{\text{slip}}] = LT^{-1}$,
- $[\boldsymbol{\omega}_s] = T^{-1}$,
- $[F] = T$,
- $[\rho_n] = [\rho_s] = ML^{-3}$,
- $[\mathbf{F}_{ns}] = [\mathbf{F}_{md}] = ML^{-2}T^{-2}$,
- $[B_\star] = [B'_\star] = [U_\star] = [V_\star] = 1$.

Les coefficients de la force de friction $\mathbf{F}_{ns}$ ont été mesurés expérimentalement. On les trouve dans le tableau 11.3 de [Donnelly and Barenghi \(1998\)](#). Dans cette référence, la force est exprimée comme:

$$\mathbf{F}_{ns} = B_{tab} \frac{\rho_s \rho_n}{\rho} \hat{\boldsymbol{\omega}}_s \times (\boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{v}_{\text{slip}}) + B'_{tab} \frac{\rho_s \rho_n}{\rho} \boldsymbol{\omega}_s \times \mathbf{v}_{\text{slip}}. \quad (5.41)$$

En comparant avec l'expression (5.35), on en déduit:

$$B_{tab} = \frac{\rho}{\rho_n} V_\star, \quad (5.42)$$

$$B'_{tab} = \frac{\rho}{\rho_n} U_\star. \quad (5.43)$$

Il ne reste plus qu'à inverser la relation (5.38):

$$B_\star = \frac{\rho_s V_\star}{\rho_n (\hat{\boldsymbol{\omega}}_s^2 V_\star^2 + (U_\star - 1)^2)}, \quad (5.44)$$

$$B'_\star = -\frac{\rho_s (\hat{\boldsymbol{\omega}}_s^2 V_\star^2 + (U_\star - 1)U_\star)}{\rho_n (\hat{\boldsymbol{\omega}}_s^2 V_\star^2 + (U_\star - 1)^2)}, \quad (5.45)$$

pour obtenir l'expression liant les coefficients $B_\star$ et $B'_\star$ aux valeurs mesurées:

$$B_\star = \frac{B_{tab} \rho \rho_s}{\rho_n^2 (B_{tab}^2 + B_{tab}^2) - 2B'_{tab} \rho \rho_n + \rho^2}, \quad (5.46)$$

$$B'_\star = \frac{B'_{tab} \rho \rho_s - \rho_n \rho_s (B_{tab}^2 + B_{tab}^2)}{\rho_n^2 (B_{tab}^2 + B_{tab}^2) - 2B'_{tab} \rho \rho_n + \rho^2}. \quad (5.47)$$

5.2.4. Terme de couplage dans l'équation de Gross-Pitaevskii

Le terme de couplage à intégrer à l'équation de Gross-Pitaevskii doit déplacer le vortex avec une vitesse additionnelle $\mathbf{v}_{\text{slip}}$. Prenons comme exemple un vortex 2D placé à l'origine dont la fonction d'onde s'écrit en coordonnées polaires (r, θ) :

$$\psi_v = R(r) e^{\pm i\theta}, \quad (5.48)$$

et qui est solution de:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_v + g |\psi_v|^2 \psi_v = 0. \quad (5.49)$$

La fonction d'onde du vortex advecté par un champ constant $\mathbf{U}^{\text{adv}}$ est donnée par:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_v(\mathbf{x} - t\mathbf{U}^{\text{adv}}), \quad (5.50)$$

et est solution de:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{U}^{\text{adv}} \cdot \nabla \psi = i \left(\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{g}{\hbar} |\psi|^2 \psi \right). \quad (5.51)$$

Une deuxième possibilité est de considérer la vitesse d'advection $\mathbf{U}_{\perp}^{\text{adv}}$ définie par:

$$\mathbf{U}_{\perp}^{\text{adv}} = \mathbf{e}_z \times \mathbf{U}^{\text{adv}}, \quad (5.52)$$

avec $\mathbf{e}_z$ le vecteur unitaire dans la direction z . La dynamique est donnée en temps imaginaire par:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - i\mathbf{U}_{\perp}^{\text{adv}} \cdot \nabla \psi = i \left(\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{g}{\hbar} |\psi|^2 \psi \right). \quad (5.53)$$

La position du vortex $(\delta x, \delta y)$ est donnée pour un temps court δt par:

$$\psi(\delta x + i\delta y, \delta t) = 0. \quad (5.54)$$

Par un développement de Taylor en temps et en espace, on obtient pour les deux cas ($\mathbf{U}^{\text{adv}}$ et dynamique (5.51) ou $\mathbf{U}_{\perp}^{\text{adv}}$ et (5.53)) l'équation suivante:

$$(\delta x + i\delta y - e^{i\theta^{\text{adv}}} \delta t) R'(0) = 0, \quad (5.55)$$

où on a posé $\mathbf{U}^{\text{adv}} = (\cos(\theta^{\text{adv}}), \sin(\theta^{\text{adv}}))$. On voit que le vortex se déplace bien à la vitesse $\mathbf{U}^{\text{adv}}$. Le terme d'advection réel dans l'équation (5.51) correspond à celui introduit par Coste (1998) par la substitution:

$$\nabla \rightarrow \nabla + \frac{i}{2\alpha} \mathbf{v}, \quad (5.56)$$

avec $\alpha = \frac{\hbar}{2m}$. On a alors l'expression suivante pour le laplacien:

$$\alpha \nabla^2 \rightarrow \alpha \nabla^2 + i\mathbf{v} \cdot \nabla + \frac{i}{2} (\nabla \cdot \mathbf{v}) - \frac{\mathbf{v}^2}{4\alpha}, \quad (5.57)$$

et l'équation de Gross-Pitaevskii devient:

$$-i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \psi + i\mathbf{v} \cdot \nabla \psi + \frac{i}{2} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \psi - \frac{\mathbf{v}^2}{4\alpha} \psi - \frac{g}{\hbar} |\psi|^2 \psi. \quad (5.58)$$

Le terme de divergence est nécessaire lorsque $\mathbf{v}$ n'est pas de divergence nulle, afin de conserver la masse. Si la vitesse $\mathbf{v}$ est constante, on retrouve l'équation décrivant l'évolution de la fonction d'onde après une transformation de Galilée de vitesse $\mathbf{v}$. En effet, l'invariance galiléenne de l'équation de Gross-Pitaevskii s'écrit:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi(\mathbf{x} - \mathbf{U}^{\text{adv}} t, t) \exp \left(i \left(\frac{\mathbf{U}^{\text{adv}}}{2\alpha} \cdot \mathbf{x} - \frac{(\mathbf{U}^{\text{adv}})^2}{4\alpha} t \right) \right), \quad (5.59)$$

et associe à $\psi(\mathbf{x}, t)$ une autre solution dont les champs vitesse et densité sont les transformations de Galilée de ceux de ψ . Le terme d'advection complexe donné par l'équation (5.53) rappelle l'approche introduite par Nore et al. (1997) pour la préparation de solution initiale de l'équation de Gross-Pitaevskii dont le champ de vitesse à grande échelle est donné par $\mathbf{U}^{\text{adv}}$. Pour cela, la dynamique utilisée est dissipative et vient de l'équation de Ginzburg-Landau. La solution initiale est alors donnée par un état stationnaire de l'équation ARGLE (Advective Real Ginzburg Landau Equation):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \psi + (\bar{\varrho}_s - \frac{g}{\hbar} |\psi|^2) \psi - i\mathbf{U}^{\text{adv}} \cdot \nabla \psi - \frac{(\mathbf{U}^{\text{adv}})^2}{4\alpha} \psi. \quad (5.60)$$

Cet état stationnaire est un minimum de l'énergie:

$$\mathcal{E}_{ARGLE} = \int \left(\alpha \left| \nabla \psi - \frac{\mathbf{U}^{\text{adv}}}{2\alpha} \psi \right|^2 + \frac{g}{2} (|\psi|^2 - \bar{\varrho}_s)^2 \right) d\mathbf{x}. \quad (5.61)$$

Le terme d'advection est de signe opposé à celui introduit dans l'équation (5.53). Cela s'explique car on recherche ici un équilibre entre le mouvement créé par les vortex et celui imposé par l'advection $\mathbf{U}^{\text{adv}}$. À travers le lien avec l'équation ARGLE, on peut voir que le couplage (5.53) est dissipatif alors que celui donné par (5.51) ne l'est pas. La force (5.40) est composée de deux termes. Le premier, associé à $U_\star$, représente une force orthogonale au contre-courant et une vitesse de glissement parallèle à $\mathbf{w}$. Le second, associé à $V_\star$, est associé à une force parallèle au contre-courant et à un déplacement perpendiculaire à celui-ci. Ce changement de direction correspond à un transfert d'énergie du superfluide vers le fluide normal dû à la friction, alors que le terme en $U_\star$ ne modifie que la vitesse de déplacement longitudinale. D'après les analyses précédentes, il est logique d'utiliser l'approche (5.51) pour le terme en $U_\star$ et l'équation (5.53) pour celui en $V_\star$. Cela revient à séparer $\mathbf{v}_{\text{slip}}$ en:

$$\mathbf{v}_{\text{slip}} = \mathbf{v}_{\text{slip}}^\parallel + \mathbf{v}_{\text{slip}}^\perp, \quad \mathbf{v}_{\text{slip}}^\parallel = U_\star \mathbf{w}_p, \quad \mathbf{v}_{\text{slip}}^\perp = V_\star \hat{\omega}_s \times \mathbf{w}. \quad (5.62)$$

On utilise les vitesses d'advection suivantes:

$$\begin{cases} \mathbf{U}^{\text{adv}} &= \mathbf{v}_{\text{slip}}^\parallel \quad \text{dans (5.51),} \\ \mathbf{U}_\perp^{\text{adv}} &= \frac{\hat{\omega}_s}{|\hat{\omega}_s|} \times V_\star \hat{\omega}_s \times \mathbf{w} = -V_\star |\hat{\omega}_s| \mathbf{w}_p \quad \text{dans (5.53).} \end{cases} \quad (5.63)$$

On obtient finalement l'expression pour $\mathbf{v}_{\text{slip}}$ utilisée comme champ de vitesse dans (5.58):

$$\boxed{\mathbf{v}_{\text{slip}} = (U_\star + iV_\star |\hat{\omega}_s|) \mathbf{w}_p.} \quad (5.64)$$

5.2.5. Dissipation et conservation de la masse

La dernière brique nécessaire pour construire le domaine est la prise en compte des ondes émises par le mouvement des vortex dans le superfluide. En effet, l'équation (5.13) est incompressible alors que (5.58) est compressible. Des ondes sonores (de pression) peuvent donc apparaître dans le superfluide mais elles ne peuvent interagir avec le fluide normal et elles doivent être dissipées. Il est donc nécessaire de rajouter de la dissipation dans l'équation de Gross-Pitaevskii. Nous reprenons la forme introduite par Kobayashi and Tsubota (2005) qui consiste à remplacer i par $i + \eta$ dans l'équation (5.10) avec $\eta \in \mathbb{R}$. On a (sans les termes de couplage):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (i + \eta_D) (\alpha \nabla^2 \psi - \frac{g}{\hbar} (|\psi|^2 - \bar{\varrho}_s) \psi). \quad (5.65)$$

L'ajout des termes de couplage et de dissipation dans l'équation (5.10) fait que la masse n'est plus conservée. Pour corriger ce problème, il est nécessaire d'introduire une correction μ calculée pour compenser les nouveaux termes lorsque l'on cherche à montrer la conservation de la masse en multipliant par $\bar{\psi}$ puis en intégrant. Cela donne:

$$\mu = \text{Re} \frac{\int \bar{\psi} \left(i \frac{\mathbf{v}_{\text{slip}}^2}{4\alpha} + (\mathbf{v}_{\text{slip}} \cdot \nabla) + \frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{slip}} - \eta_D \alpha \nabla^2 + \eta_D \frac{g}{\hbar} (|\psi|^2 - \bar{\varrho}_s) \right) \psi d\mathbf{x}}{\int |\psi|^2 d\mathbf{x}}. \quad (5.66)$$

Finalement l'équation utilisée pour le superfluide est:

$$\boxed{\frac{\partial \psi}{\partial t} = (i + \eta_D) (\alpha \nabla^2 \psi - \frac{g}{\hbar} (|\psi|^2 - \bar{\varrho}_s) \psi) - (\mathbf{v}_{\text{slip}} \cdot \nabla) \psi - \frac{1}{2} (\nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{slip}}) \psi - i \frac{\mathbf{v}_{\text{slip}}^2}{4\alpha} \psi + \mu \psi.} \quad (5.67)$$

5.3. Méthodes numériques

5.3.1. Equations de Navier-Stokes

Le modèle présenté dans la section précédente a été implémenté dans le code Fortran GPS (Parnaudeau et al., 2015) en utilisant une méthode pseudo-spectrale. Le code est parallélisé en utilisant les bibliothèques MPI et OpenMP, ce qui est nécessaire pour réaliser des simulations 3D à haute résolution.

L'équation de Navier-Stokes n'est pas utilisée dans la formulation (5.13). En effet, nous travaillons avec la vorticité à la place de la pression. Pour cela, il faut utiliser l'identité:

$$(\mathbf{v}_n \cdot \nabla) \mathbf{v}_n = \frac{1}{2} \nabla^2 \mathbf{v}_n - \mathbf{v}_n \times \boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2} \nabla^2 \mathbf{v}_n + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_n. \quad (5.68)$$

avec $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v}_n$. En remplaçant dans (5.13), on obtient:

$$\frac{\partial \mathbf{v}_n}{\partial t} + \underbrace{\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_n}_P = -\nabla \left(p + \frac{1}{2} \mathbf{v}_n^2 \right) + \nu_n \nabla^2 \mathbf{v}_n. \quad (5.69)$$

En prenant la divergence des deux côtés de l'équation précédente, on obtient:

$$\nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_n}{\partial t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_n) = -\nabla \cdot \nabla P + \nu_n \nabla \cdot \nabla^2 \mathbf{v}_n. \quad (5.70)$$

Puisque $\nabla \cdot \mathbf{v}_n = 0$, cela se simplifie en:

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_n) = -\nabla^2 P. \quad (5.71)$$

En prenant la transformée de Fourier (les grandeurs spectrales sont notées avec un $\hat{}$), on en déduit:

$$\hat{P} = \frac{i\mathbf{k}}{k^2} \cdot \mathcal{F}(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_n) = -\frac{i\mathbf{k}}{k^2} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{v}_n), \quad (5.72)$$

avec $\mathbf{G}(\mathbf{v}_n) = -\mathcal{F}(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}_n)$. L'équation (5.69) devient:

$$\boxed{\frac{\partial \hat{\mathbf{v}}_n}{\partial t} - \mathbf{G}(\mathbf{v}_n) + \mathbf{k} \left(\frac{\mathbf{k}}{k^2} \cdot \mathbf{G}(\mathbf{v}_n) \right) = -\nu_n k^2 \hat{\mathbf{v}}_n}, \quad (5.73)$$

ou encore, par composante :

$$\frac{\partial \hat{v}_n^{(i)}}{\partial t} = \left(\underbrace{1 - \frac{k^{(i)} k^{(j)}}{k^2}}_{\Pi} \right) G(\mathbf{v}_n)^{(j)} - \nu_n k^2 \hat{v}_n^{(i)}. \quad (5.74)$$

L'opérateur Π permet la projection du terme non-linéaire $\mathbf{G}(\mathbf{v}_n)$ sur les fonctions de divergence nulle. C'est cette équation qui est utilisée dans le code pseudo-spectral avec une décomposition où le terme $\mathbf{G}$ et la force de couplage sont appliqués dans un premier temps, puis le terme de viscosité dans un second temps.

5.3.2. Adimensionnement

Les équations sont adimensionnées en fixant des échelles de longueurs et de temps. La fonction d'onde est adimensionnée par rapport à la densité en l'absence de vortex $\bar{\varrho}_s$:

$$\tilde{x} = \frac{x}{x_{ref}}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{t_{ref}}, \quad \tilde{\psi} = \frac{\psi}{\sqrt{\bar{\varrho}_s}}, \quad \tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_{ref}}. \quad (5.75)$$

On obtient l'équation adimensionnée pour le superfluide:

$$\frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial \tilde{t}} = (i + \eta_D)(\tilde{\alpha} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\psi} - \tilde{\beta}(|\tilde{\psi}|^2 - 1)\tilde{\psi}) - (\tilde{\mathbf{v}}_{slip} \cdot \tilde{\nabla})\tilde{\psi} - \frac{1}{2}(\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{slip})\tilde{\psi} - i\frac{\tilde{\mathbf{v}}_{slip}^2}{4\tilde{\alpha}}\tilde{\psi} + \tilde{\mu}\tilde{\psi}, \quad (5.76)$$

avec:

$$\tilde{\alpha} = \frac{\hbar}{2m} \frac{t_{ref}}{x_{ref}^2}, \quad (5.77)$$

$$\tilde{\beta} = \frac{g}{\hbar} \bar{\varrho}_s t_{ref}, \quad (5.78)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_{slip} = (U_\star + iV_\star|\hat{\boldsymbol{\omega}}_s|)\tilde{\mathbf{w}}_\perp, \quad (5.79)$$

$$\tilde{\mu} = Re \frac{\int \tilde{\psi} \left(i\frac{\tilde{\mathbf{v}}_{slip}^2}{4\tilde{\alpha}} + (\tilde{\mathbf{v}}_{slip} \cdot \tilde{\nabla}) + \frac{1}{2}\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{v}}_{slip} - \eta_D \tilde{\alpha} \tilde{\nabla}^2 + \eta_D \tilde{\beta}(|\tilde{\psi}|^2 - 1) \right) \tilde{\psi} d\tilde{\mathbf{x}}}{\int |\tilde{\psi}|^2 d\tilde{\mathbf{x}}}. \quad (5.80)$$

Pour le fluide normal, on a:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_n}{\partial \tilde{t}} - \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{v}_n) + \tilde{\mathbf{k}} \left(\frac{\tilde{\mathbf{k}}}{\tilde{k}^2} \cdot \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{v}_n) \right) = -\tilde{\nu}_n \tilde{\mathbf{k}}^2 \tilde{\mathbf{v}}_n + \frac{1}{\tilde{\rho}_n} \tilde{\mathbf{F}}_{ns}, \quad (5.81)$$

avec:

$$\tilde{\nu}_n = \frac{t_{ref}}{x_{ref}^2} \nu_n, \quad (5.82)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_{ns} = \tilde{\rho}_s \tilde{\boldsymbol{\omega}}_s \times (U_\star \tilde{\mathbf{w}}_\perp + V_\star \hat{\boldsymbol{\omega}}_s \times \tilde{\mathbf{w}}_\perp). \quad (5.83)$$

Pour définir les grandeurs de référence, nous utilisons l'approche utilisée par [Kobayashi et al. \(2021\)](#) et [Nore et al. \(1997\)](#). La longueur de la boîte est fixée à $\mathcal{L} = 2\pi$ et les masses volumiques sont exprimées par rapport à la masse volumique totale: $\rho_{ref} = \rho_n + \rho_s$. La fonction d'onde initiale est choisie telle que $\bar{\varrho}_s = 1$. Les longueurs de cicatrization et vitesse du son adimensionnées $\tilde{\xi}$ et $\tilde{c}$ définies par:

$$\tilde{\xi} = \frac{\xi}{x_{ref}} = \sqrt{\frac{\tilde{\alpha}}{\tilde{\beta}}}, \quad \tilde{c} = c \frac{x_{ref}}{t_{ref}} = \sqrt{2\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}, \quad (5.84)$$

permettent de définir les échelles de temps et d'espace. On fixe $\tilde{c} = 2$ et $\tilde{\xi}$ est adaptée selon la résolution pour garantir une discrétisation suffisante des vortex (de rayon ξ). En pratique nous prenons $\xi = \frac{7.5}{N_x}$ avec N_x le nombre de points dans la direction x , soit $\xi \approx 1.2\delta x$ avec δx l'espacement entre deux points de la grille. Dans la suite, les grandeurs utilisées sont sans dimensions et la notation $\sim$ est abandonnée.

5.3.3. Algorithme pour l'évolution en temps

Les équations (5.67) et (5.69) sont résolues par une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4. Les étapes sont les suivantes:

- le calcul des termes de couplage dans l'algorithme 1,
- l'évaluation des fonctions dans l'algorithme 2,
- le pas de temps dans l'algorithme 3.

Afin d'alléger les notations, les transformées de Fourier ne sont pas indiquées, mais le code est pseudo-spectral et la plupart des calculs se font dans l'espace de Fourier. La règle des $\frac{2}{3}$ est utilisée pour désaliaser quand c'est nécessaire. Une description du code et des différents paramètres utilisés est donnée en annexe C.

Algorithme 1 : Calcul des termes de couplage: `eval_Fns_vslip`

Data : $\psi, \mathbf{v}_n$

Result : $\mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{slip}$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_s^\epsilon &\leftarrow i\alpha \frac{\psi \nabla \bar{\psi} - \bar{\psi} \nabla \psi}{|\psi|^2 + \epsilon^2}; \\ \mathbf{v}_s^{reg} &\leftarrow (1 + \epsilon^2) \mathcal{F}^{-1} \left(\exp \left(-\frac{k^2}{k_{reg}^2} \right) \mathcal{F}(\mathbf{v}_s^\epsilon) \right); \\ \mathbf{v}_s^{reg} &\leftarrow \Pi \mathbf{v}_s^{reg}; \\ \boldsymbol{\omega}_s &\leftarrow \nabla \times \mathbf{v}_s^{reg}; \\ \mathbf{w} &\leftarrow \mathbf{v}_n - \mathbf{v}_s^{reg}; \\ \mathbf{w}_p &\leftarrow \mathbf{w} - \frac{\mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\omega}_s}{\boldsymbol{\omega}_s \cdot \boldsymbol{\omega}_s} \boldsymbol{\omega}_s; \\ U_\star &\leftarrow \frac{\rho_n (B_\star^2 F^2 |\boldsymbol{\omega}_s|^2 \rho_n + B'_\star (\rho_s + \rho_n B'_\star))}{B_\star^2 F^2 |\boldsymbol{\omega}_s|^2 \rho_n^2 + (\rho_s + \rho_n B'_\star)^2}; \\ V_\star &\leftarrow \frac{B_\star \rho_n \rho_s}{B_\star^2 F^2 |\boldsymbol{\omega}_s|^2 \rho_n^2 + (\rho_s + \rho_n B'_\star)^2}; \\ \mathbf{v}_{slip} &\leftarrow (U_\star + iV_\star |\hat{\boldsymbol{\omega}}_s|) \mathbf{w}_p; \\ \mathbf{F}_{ns} &\leftarrow \rho_s \boldsymbol{\omega}_s \times (U_\star \mathbf{w}_p + V_\star \hat{\boldsymbol{\omega}}_s \times \mathbf{w}); \\ \mathbf{F}_{ns} &\leftarrow \Pi \mathbf{F}_{ns}; \end{aligned}$$

Algorithme 2 : Calcul des termes non-linéaires: `eval_rhs`

Data : $\psi, \mathbf{v}_n, \mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}}$

Result : $rhsNS, rhsGP$

$$\boldsymbol{\omega} \leftarrow \nabla \times \mathbf{v}_n;$$

$$\mathbf{G} \leftarrow \mathbf{v}_n \times \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{\rho_n} \mathbf{F}_{ns};$$

$$rhsNS \leftarrow \Pi \mathbf{G};$$

$$\mu \leftarrow Re \frac{\int \bar{\psi} \left(i \frac{\mathbf{v}_{\text{slip}}^2}{4\alpha} + (\mathbf{v}_{\text{slip}} \cdot \nabla) + \frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{slip}} - \eta_D \alpha \nabla^2 + \eta_D \beta (|\psi|^2 - 1) \right) \psi d\mathbf{x}}{\int |\psi|^2 d\mathbf{x}};$$

$$rhsGP \leftarrow (i + \eta_D)(\alpha \nabla^2 \psi - \beta (|\psi|^2 - 1)\psi) - (\mathbf{v}_{\text{slip}} \cdot \nabla)\psi - \frac{1}{2}(\nabla \cdot \mathbf{v}_{\text{slip}})\psi - i \frac{\mathbf{v}_{\text{slip}}^2}{4\alpha} \psi + \mu \psi;$$

Algorithme 3 : Calcul d'un pas de temps

Data : $\psi, \mathbf{v}_n$

Result : $\psi, \mathbf{v}_n$

$$\mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}} \leftarrow \text{eval_Fns_vslip}(\psi, \mathbf{v}_n);$$

$$rhsNS1, rhsGP1 \leftarrow \text{eval_rhs}(\psi, \mathbf{v}_n, \mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}});$$

$$\mathbf{v}_2 \leftarrow \mathbf{v}_n + \frac{\delta t}{2} rhsNS1;$$

$$\psi_2 \leftarrow \psi + \frac{\delta t}{2} rhsGP1;$$

$$\mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}} \leftarrow \text{eval_Fns_vslip}(\psi_2, \mathbf{v}_2);$$

$$rhsNS2, rhsGP2 \leftarrow \text{eval_rhs}(\psi_2, \mathbf{v}_2, \mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}});$$

$$\mathbf{v}_3 \leftarrow \mathbf{v}_n + \frac{\delta t}{2} rhsNS2;$$

$$\psi_3 \leftarrow \psi + \frac{\delta t}{2} rhsGP2;$$

$$\mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}} \leftarrow \text{eval_Fns_vslip}(\psi_3, \mathbf{v}_3);$$

$$rhsNS3, rhsGP3 \leftarrow \text{eval_rhs}(\psi_3, \mathbf{v}_3, \mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}});$$

$$\mathbf{v}_4 \leftarrow \mathbf{v}_n + \delta t rhsNS3;$$

$$\psi_4 \leftarrow \psi + \delta t rhsGP3;$$

$$\mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}} \leftarrow \text{eval_Fns_vslip}(\psi_4, \mathbf{v}_4);$$

$$rhsNS4, rhsGP4 \leftarrow \text{eval_rhs}(\psi_4, \mathbf{v}_4, \mathbf{F}_{ns}, \mathbf{v}_{\text{slip}});$$

$$\psi \leftarrow \psi + \frac{1}{6} nlkGP1 + \frac{1}{3} nlkGP2 + \frac{1}{3} nlkGP3 + \frac{1}{6} nlkGP4;$$

$$\mathbf{v}_n \leftarrow \left(\mathbf{v}_n + \frac{1}{6} nlkNS1 + \frac{1}{3} nlkNS2 + \frac{1}{3} nlkNS3 + \frac{1}{6} nlkNS4 \right) e^{-\nu_n \delta t k^2};$$

5.4. Validation du modèle et sélection des paramètres

On peut séparer les grandeurs intervenant dans les équations en deux catégories. D'un côté, certaines décrivent la situation physique que l'on souhaite simuler. C'est le cas des paramètres de friction $B_\star$ et $B'_\star$ (ou B_{tab} et B'_{tab}), des densités du superfluide ρ_s et du fluide normal ρ_n et de la viscosité ν_n . Ces paramètres dépendent de la température et peuvent être trouvés dans les tables (par exemple celles assemblées par [Barenghi et al. \(1983\)](#) ou [Donnelly and Barenghi \(1998\)](#)) ou ajustés à la main pour une étude qualitative d'une situation.

Trois autres paramètres existent: ϵ , k_{reg} et η_D . Ce sont des paramètres numériques nécessaires au bon fonctionnement du modèle. Le premier permet d'éviter la singularité lors du calcul de la vitesse le long de la ligne de vortex. Il doit être lié à la grandeur $\bar{\rho}_s$ représentant la densité en l'absence de vortex. En pratique, nous prenons $\epsilon = 0.1$. La valeur de k_{reg} définit la zone sur laquelle la vitesse superfluide est régularisée. Puisque le rayon du vortex est de l'ordre de ξ , on veut que k_{reg} soit de l'ordre de $\frac{1}{\xi}$. Enfin, le paramètre de dissipation η_D permet d'atténuer les ondes de pression émises par les vortex et est nécessaire pour éviter l'effet de repoussement apparaissant entre deux vortex proches du fait de la régularisation de la vitesse.

Des équivalents de ϵ et k_{reg} existent dans les modèles de [Galantucci et al. \(2020\)](#) et [Inui and Tsubota \(2021\)](#) où il faut également pouvoir évaluer la vitesse superfluide le long de la ligne de vortex avant de la distribuer dans le fluide normal alentours. La suite de cette section va présenter les vérifications du fonctionnement du modèle et le choix des paramètres k_{reg} et η_D .

5.4.1. Cristal de vortex

Le premier test numérique consiste en un réseau stationnaire de vortex en 2D. Le but est de vérifier que, dans un cas où $\mathbf{v}_s^{reg} = 0$, le terme de couplage dans l'équation de Gross-Pitaevskii donne une dynamique quantitativement correcte à temps court. Pour cela, un cristal formé de deux vortex positifs en $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ et $(\frac{3\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ et de deux vortex négatifs en $(\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ et $(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ est créé. La solution initiale est donnée par:

$$\psi_{init} = \frac{\cos(x) + i \cos(y)}{\sqrt{2}}. \quad (5.85)$$

Ensuite, l'équation ARGLE (5.60) est résolue jusqu'à convergence avec $\mathbf{U}^{adv} = 0$ afin d'obtenir les vortex. Si l'on considère uniquement la dynamique habituelle de l'équation de Gross-Pitaevskii, cette structure est stable: par symétrie, la vitesse superfluide est nulle à l'emplacement des vortex et ils ne bougent pas. Par contre, la structure va être détruite dès que la distance entre les vortex est modifiée. On peut dans un premier temps vérifier le calcul de la vitesse superfluide régularisée et de la vorticit  superfluide. Ces deux grandeurs sont représentées en figure 5.1. On retrouve bien les comportements attendus: la vorticit  est r partie autour des vortex et   le bon signe alors que la vitesse superfluide est bien nulle   l'emplacement des vortex et  volue en $\frac{1}{r}$.

Si nous consid rons un couplage dans une direction, c'est   dire que la vitesse du fluide normal est fix e et n'est pas modifi e par la dynamique du superfluide, alors le mouvement des vortex   temps court peut  tre impos . Comme on a $\mathbf{v}_L = \mathbf{v}_{slip}$, et gr ce aux  quations (5.35) et (5.42), on peut fixer:

$$\mathbf{v}_L = \mathbf{v}_{slip}^\parallel \mathbf{w} + \mathbf{v}_{slip}^\perp \hat{\omega}_s \times \mathbf{w}, \quad (5.86)$$

o  $\mathbf{v}_{slip}^\perp$ et $\mathbf{v}_{slip}^\parallel$ correspondent au mouvement que l'on cherche   imposer.

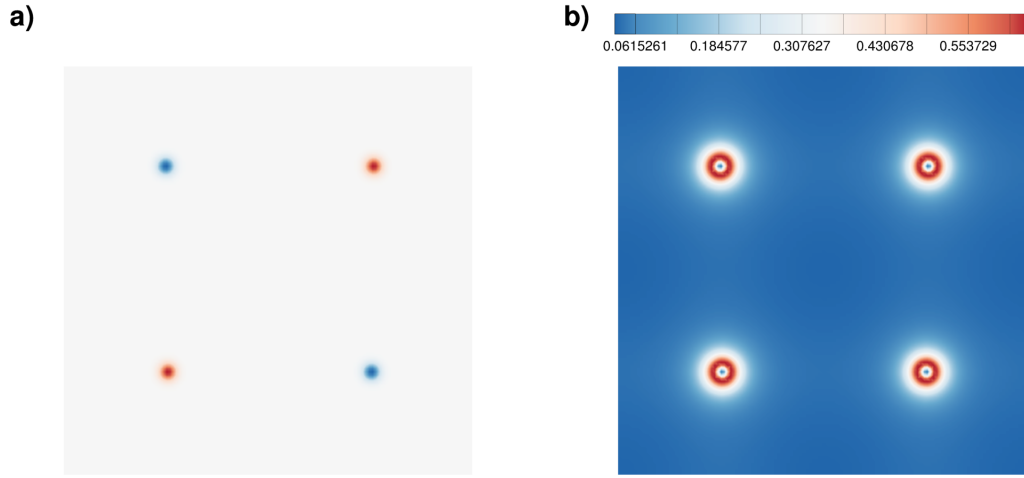


Figure 5.1.: Cristal de vortex: a) vorticité superfluide et b) vitesse superfluide régularisée.

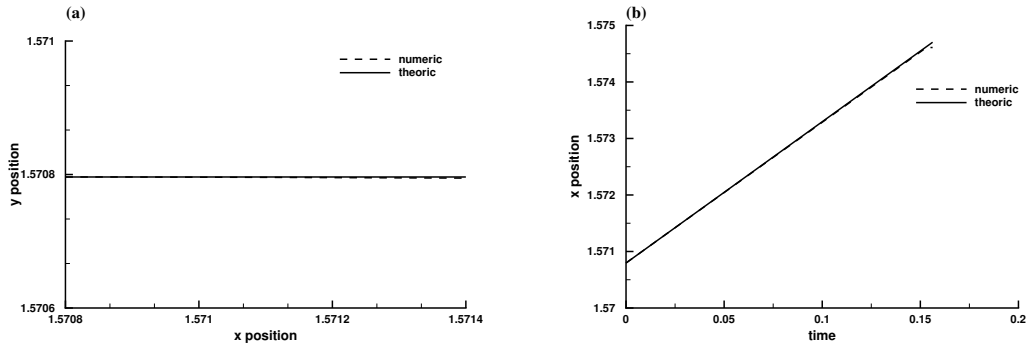


Figure 5.2.: Déplacement horizontal d'un vortex du cristal: a) déplacement du vortex, b) position au cours du temps pour $\mathbf{v}_{\text{slip}}^{\parallel} = 0.025$, $\mathbf{v}_{\text{slip}}^{\perp} = 0$, $v_n = 1.06$.

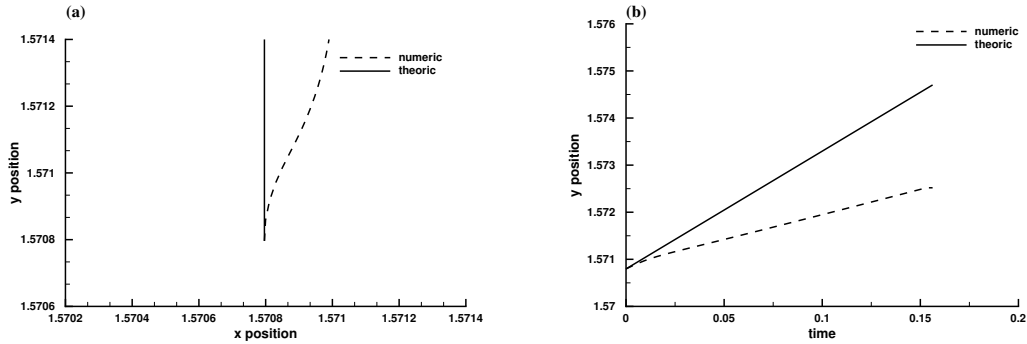


Figure 5.3.: Déplacement vertical d'un vortex du cristal: a) déplacement du vortex, b) position au cours du temps pour $\mathbf{v}_{\text{slip}}^{\parallel} = 0$, $\mathbf{v}_{\text{slip}}^{\perp} = 0.025$, $v_n = 0.5$.

Pour obtenir ce mouvement, les coefficients de friction sont donnés par:

$$B_{tab} = \frac{\rho_n + \rho_s}{\rho_n} \mathbf{v}_{\text{slip}}^\perp, \quad B_{tab} = \frac{\rho_n + \rho_s}{\rho_n} \mathbf{v}_{\text{slip}}^\parallel. \quad (5.87)$$

Nous considérons deux cas où la vitesse du fluide normal $\mathbf{v}_n$ est orientée suivant l'axe x :

- $\mathbf{v}_{\text{slip}}^\parallel = 0.025$, $\mathbf{v}_{\text{slip}}^\perp = 0$, $v_n = 1.06$: les résultats sont affichés en figure 5.2 et on retrouve bien une translation du cristal suivant l'axe x . $\mathbf{v}_s^{reg}$ reste nulle et la structure est donc stable. On a ici $B_{tab} = 0$, $B'_{tab} = 0.05$.
- $\mathbf{v}_{\text{slip}}^\parallel = 0$, $\mathbf{v}_{\text{slip}}^\perp = 0.025$, $v_n = 0.5$: ici, le déplacement des vortex perpendiculairement au contre-courant déstabilise le cristal du fait de l'apparition d'une vitesse superfluide $\mathbf{v}_s^{reg}$. Le déplacement donné par (5.86) est alors uniquement valide à temps court. On voit sur la figure (5.3) que le vortex se déplace bien suivant l'axe y et que la vitesse initiale est proche de celle attendue. On a ici $B_{tab} = 0.1$, $B'_{tab} = 0$.

5.4.2. Paire de vortex

Ensuite, nous vérifions le bon fonctionnement du modèle en étudiant une paire de vortex de vorticités opposées dans le superfluide. Les positions initiales sont $(x_+, y_+) = (x_0, \pi + \frac{R_0}{2})$ et $(x_-, y_-) = (x_0, \pi - \frac{R_0}{2})$ avec x_0 l'abscisse de départ et R_0 le rayon initial de la paire. En l'absence de friction, les deux vortex vont avancer à vitesse constante et le rayon ne varie pas. Le couplage va entraîner un transfert d'énergie du superfluide vers le fluide normal, ce qui se traduit par une diminution du rayon de la paire. Au bout d'un certain temps, les vortex vont alors se rencontrer et s'annihiler. Dans le cas d'un couplage uniquement du superfluide vers le fluide normal et avec une vitesse $\mathbf{v}_n$ fixe (considérée par simplification uniquement dans l'axe x), il est possible d'obtenir une expression caractérisant le mouvement du vortex. Si l'on reprend l'expression (5.26) en considérant les vecteurs suivants:

$$\mathbf{v}_L = \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_s = \begin{pmatrix} v_s \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_n = \begin{pmatrix} v_n \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega}_s = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega_s \end{pmatrix}, \quad \dot{\boldsymbol{\omega}}_s = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.88)$$

on peut obtenir les équations suivantes pour les déplacements $\dot{x}$ et $\dot{y}$:

$$-\rho_n B_\star v_n + \rho_n B_\star \dot{x} + (\rho_s + \rho_n B'_\star) \dot{y} = 0, \quad (5.89)$$

$$\rho_n B'_\star v_n + \rho_s v_s - (\rho_n B'_\star + \rho_s) \dot{x} + \rho_n B_\star \dot{y} = 0, \quad (5.90)$$

ce qui donne:

$$\dot{x} = \frac{(\rho_n B'_\star v_n + \rho_s v_s)(\rho_s + \rho_n B'_\star) + \rho_n^2 B_\star^2 v_n}{\rho_n^2 B_\star^2 + (\rho_s + \rho_n B'_\star)^2}, \quad (5.91)$$

$$\dot{y} = \frac{\rho_n \rho_s B_\star}{\rho_n^2 B_\star^2 + (\rho_s + \rho_n B'_\star)^2} (v_n - v_s). \quad (5.92)$$

Dans le cas d'une paire de vortex dans un domaine périodique, la vitesse induite par les vortex $\mathbf{v}_s$ est connue et donnée par Griffin et al. (2020):

$$v_s = \frac{\Gamma}{4\pi} \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(d)}{\cosh(2\pi n) - \cos(d)} + \frac{d}{\pi} \right), \quad (5.93)$$

où $\Gamma = \frac{h}{m} = 4\pi\alpha$ est le quantum de circulation. On peut simplifier en ne prenant que le terme $n = 0$:

$$v_s \approx \alpha \left(\frac{1 + \cos(d)}{\sin(d)} + \frac{d}{\pi} \right). \quad (5.94)$$

Avec une expression pour la vitesse superfluide, il suffit d'intégrer numériquement en temps pour obtenir l'évolution attendue de la position du vortex:

$$x(t) = \int_0^t \dot{x}(s) ds, \quad (5.95)$$

$$R(t) = \int_0^t \dot{y}(s) ds, \quad (5.96)$$

$$(5.97)$$

où $R(t)$ représente l'évolution du rayon de la paire de vortex au cours du temps. La solution initiale correspondant à une (ou plusieurs) paires de vortex dans une boîte périodique a été calculée par [Billam et al. \(2014\)](#). La densité est obtenue en multipliant deux approximants de Padé (2.50) et la phase est donnée par:

$$\begin{aligned} \theta(x, y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left\{ \arctan \left[\tanh \left(\frac{y - y_- + 2\pi n}{2} \right) \tan \left(\frac{x - x_- - \pi}{2} \right) \right] \right. \\ \left. - \arctan \left[\tanh \left(\frac{y - y_+ + 2\pi n}{2} \right) \tan \left(\frac{x - x_+ - \pi}{2} \right) \right] + \pi [H(x - x_+) - H(x - x_-)] \right\} \\ - \frac{x_+ - x_-}{2\pi} y - x H(|y_+ - y_-| - \pi) + y H(|x_+ - x_-| - \pi). \end{aligned} \quad (5.98)$$

où H est la fonction de Heaviside. La position des vortex est suivie au cours de la simulation par une méthode de Newton. La comparaison entre les résultats numériques et l'expression théorique (5.95) permet de fixer les paramètres du modèle. Le processus est représenté en figure 5.4. En 5.4a, différentes valeurs de k_{reg} sont testées sans dissipation. La meilleure valeur est $k_{reg} = \frac{1}{\xi}$. L'écart entre le résultat attendu et les valeurs observées est ajusté en 5.4b. On observe qu'une dissipation fixée à $\eta_D = 0.02B_{tab}$ donne un bon accord avec la courbe théorique. Ces résultats sont testés pour différentes valeurs de B_{tab} en 5.4c, et les différentes courbes numériques et théoriques coïncident quasiment parfaitement, ce qui valide le choix des paramètres. On observe bien le comportement attendu: plus le paramètre de friction est faible, plus le rayon diminue lentement. Ces tests sont effectués avec $\rho_n = \rho_s = 0.5$, $v_n = 0$ et, pour les deux premiers graphes, $B_{tab} = 0.6$.

Si la force de friction perpendiculaire au mouvement et caractérisée par B'_{tab} est trop importante, il est nécessaire de diminuer le paramètre de dissipation à $\eta_D = 0.01B_{tab}$. Les évolutions temporelles du rayon et des positions des vortex sont montrées en figures 5.5 et 5.6 pour deux valeurs différentes de B'_{tab} . Avec l'ajustement de la dissipation, on obtient de bons résultats dans les deux cas.

Une fois le comportement du modèle avec un couplage uniquement dans un sens validé, il est possible d'étudier l'influence du couplage complet. Dans ce cas, le mouvement de la paire de vortex dans un fluide normal initialement au repos va le perturber, ce qui va en retour diminuer la vitesse de rapprochement des vortex (5.95). Les résultats obtenus sont indiqués en figure 5.7 et correspondent au comportement attendu. La vorticit  du fluide normal est représentée en figures 5.8 et 5.9. On observe l'apparition de deux paires de vortex dans le fluide normal, de fa on analogue au vortex ring observ  en 3D dans les simulations de [Galantucci et al. \(2020\)](#). Ces deux paires sont situ es avant et apr s la paire dans le superfluide et la valeur de B'_{tab} contr le laquelle des deux structure   le plus grand rayon.

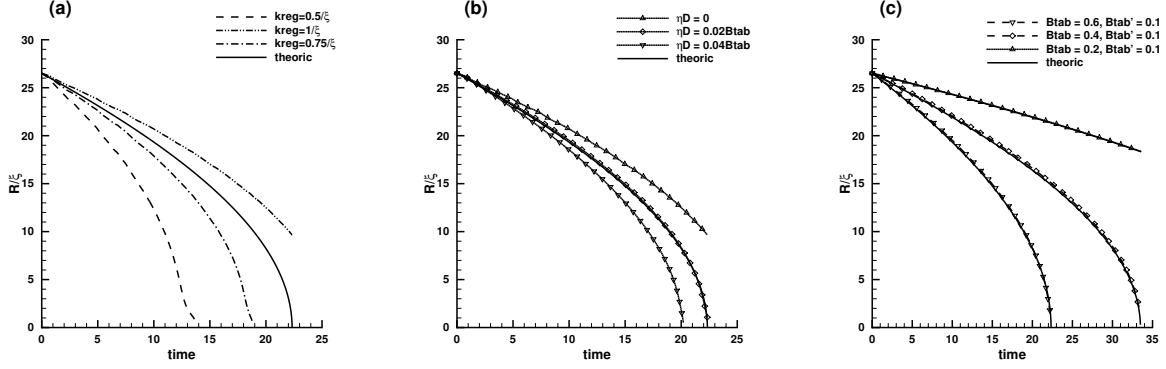


Figure 5.4.: Évolution du rayon de la paire au cours du temps: a) pour différentes valeurs de k_{reg} , b) pour différentes valeurs du paramètre de dissipation η_D , c) pour différents coefficients de friction B_{tab} et B'_{tab} . Pour chaque cas, la solution analytique (5.95) est affichée en trait plein.

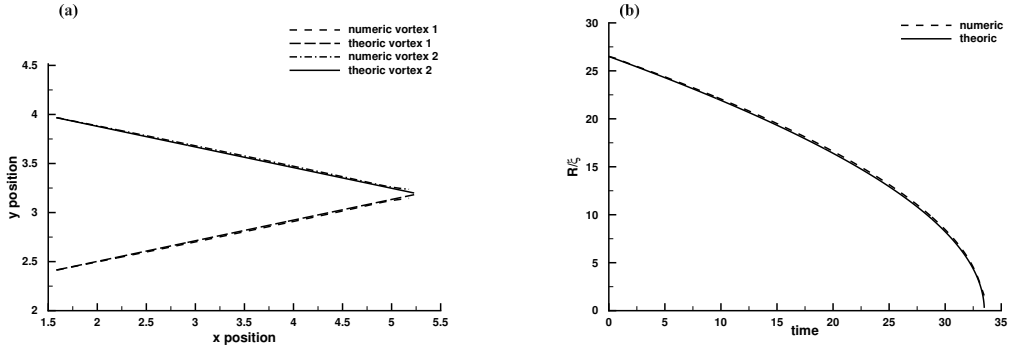


Figure 5.5.: Comparaison des résultats numériques et théoriques: a) position des vortex et b) rayon de la paire au cours du temps. Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.1$, $\eta_D = 0.02B_{tab}$.

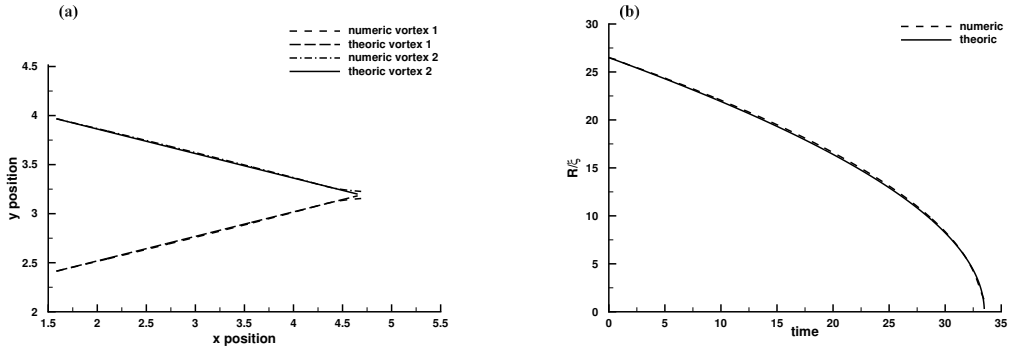


Figure 5.6.: Comparaison des résultats numériques et théoriques: a) position des vortex et b) rayon de la paire au cours du temps. Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.4$, $\eta_D = 0.01B_{tab}$.

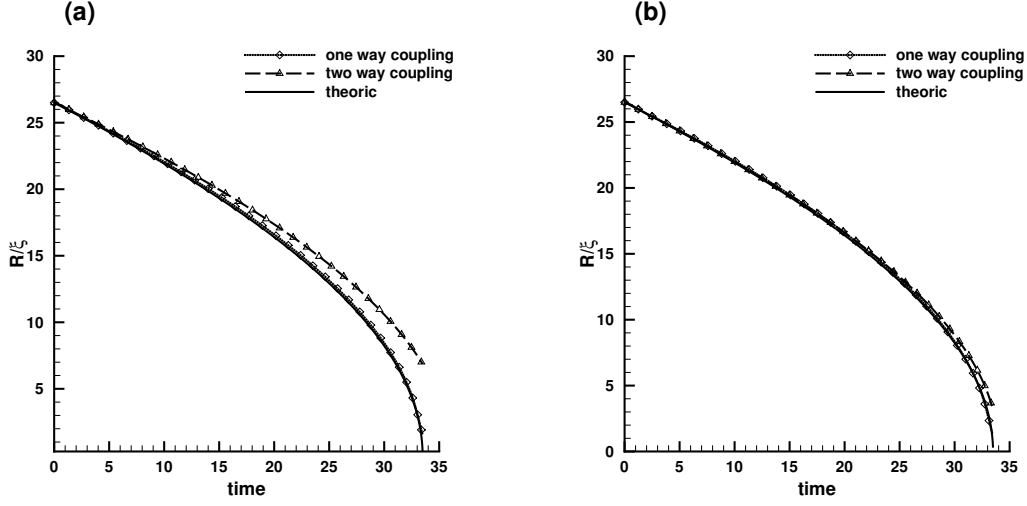


Figure 5.7.: Comparaison du comportement de la paire pour des couplages dans un et deux sens: a) $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.1$, $\eta_D = 0.02B_{tab}$, b) $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.4$, $\eta_D = 0.01B_{tab}$.

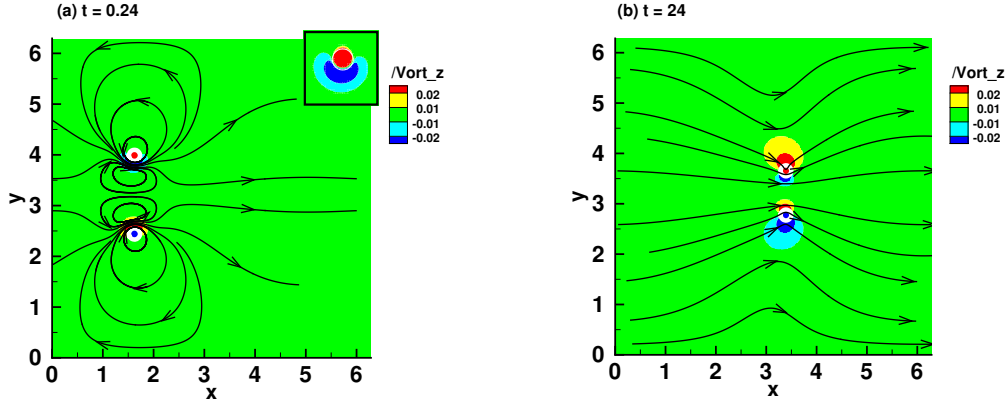


Figure 5.8.: Vorticité du fluide normal et lignes de courant de la vitesse $\mathbf{v}_n$ pour a) $t = 0.24$ et b) $t = 24$. Les cercles blancs représentent l'isoligne $|\psi|^2 = 0.5$ et montrent la position du vortex. Pour la première figure, un encart montre les deux vortex apparaissant dans le fluide normal. Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.1$, $\eta_D = 0.02B_{tab}$.

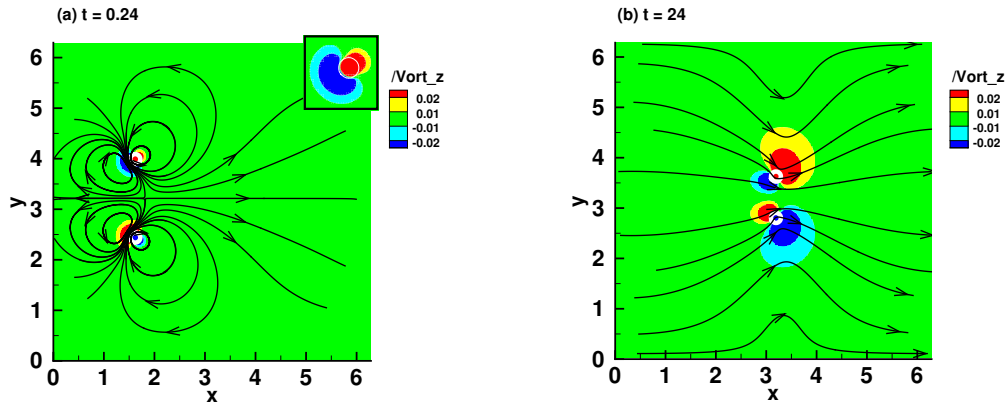


Figure 5.9.: Vorticité du fluide normal et lignes de courant de la vitesse $\mathbf{v}_n$ pour a) $t = 0.24$ et b) $t = 24$. Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.4$, $\eta_D = 0.01B_{tab}$.

5.4.3. Anneau de vorticit 

L'anneau de vorticit  en 3D joue le m me r le que la paire de vortex en 2D. Si l'on consid re un anneau avan ant le long de l'axe x , on peut noter dans le cas du couplage dans un sens et en coordonn es cylindriques (r, θ, x) les vecteurs suivants:

$$\mathbf{v}_L = \begin{pmatrix} \dot{R} \\ 0 \\ \dot{x} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_s = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ v_s \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ v_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\omega}_s = \begin{pmatrix} 0 \\ \omega_s \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\boldsymbol{\omega}}_s = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.99)$$

avec $\dot{x}$ la vitesse de d placement de l'anneau le long de l'axe x et $\dot{R}$ la vitesse de r duction du rayon. Ce dernier ne varie pas en l'absence de friction et la vitesse $\dot{x}$ est alors constante. L' quation (5.26) nous donne des expressions similaires   celles obtenues avec la paire de vortex:

$$\dot{x} = \frac{(\rho_n B'_* v_n + \rho_s v_s)(\rho_s + \rho_n B'_*) + \rho_n^2 B_*^2 v_n}{\rho_n^2 B_*^2 + (\rho_s + \rho_n B'_*)^2}, \quad (5.100)$$

$$\dot{R} = \frac{\rho_n \rho_s B_*}{\rho_n^2 B_*^2 + (\rho_s + \rho_n B'_*)^2} (v_n - v_s). \quad (5.101)$$

Dans le cas de l'anneau de vortex, la vitesse superfluide est donn e par [Barenghi et al. \(1983\)](#):

$$v_s = \frac{\alpha}{R} \left(\log \left(\frac{8R}{\xi} \right) - 0.615 \right), \quad (5.102)$$

o  R est le rayon de l'anneau. On peut de nouveau int grer num riquement en temps pour obtenir l' volution du vortex:

$$x(t) = \int_0^t \dot{x}(s) ds, \quad (5.103)$$

$$R(t) = \int_0^t \dot{R}(s) ds. \quad (5.104)$$

Un anneau de vortex peut  tre construit par rotation cylindrique de l'approximant de Pad  (2.50). Une r solution de l' quation ARGLE (5.60) avec le champ de vitesse donn  par (5.102) permet d'am liorer cette solution initiale. Il est ensuite possible de suivre le d placement du vortex au cours du temps et de comparer avec l'allure d crite par l' quation (5.103). Les r sultats, affich s en figure 5.10 montrent un bon accord entre le mouvement observ  et celui d crit par (5.103). Le seul param tre   modifier lors du passage en trois dimensions est la dissipation, et il faut de nouveau diminuer η_D lorsque B'_{tab} augmente. De la m me fa on que pour la paire, et comme observ  par [Inui and Tsubota \(2021\)](#), le rayon de l'anneau diminue moins vite lorsque l'on utilise le mod le complet. Dans ce cas, deux anneaux de vortex de signe oppos s apparaissent dans le fluide classique et on retrouve la structure pr dite par [Kivotides et al. \(2000\)](#) et obtenue num riquement par [Galantucci et al. \(2020\)](#). Des isosurfaces de vorticit  montrent les deux vortex apparus dans le fluide normal dans les figures 5.11 et 5.12. On observe que dans le fluide normal, lorsque $B_{tab} \approx B'_{tab}$, le plus petit vortex est derri re le vortex superfluide, alors qu'il est devant lorsque $B_{tab} \gg B'_{tab}$.

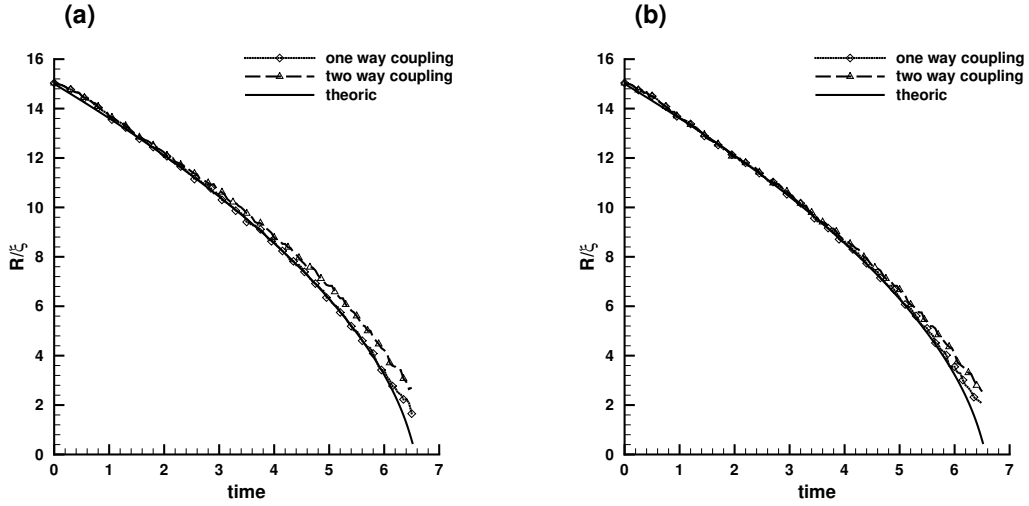


Figure 5.10.: Évolution du rayon de l'anneau au cours du temps pour les couplages dans une et deux directions. Les paramètres sont a) $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.1$, $\eta_D = 0.05B_{tab}$, b) $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.4$, $\eta_D = 0.035B_{tab}$. Pour chaque cas, la solution analytique (5.103) est affichée en trait plein.

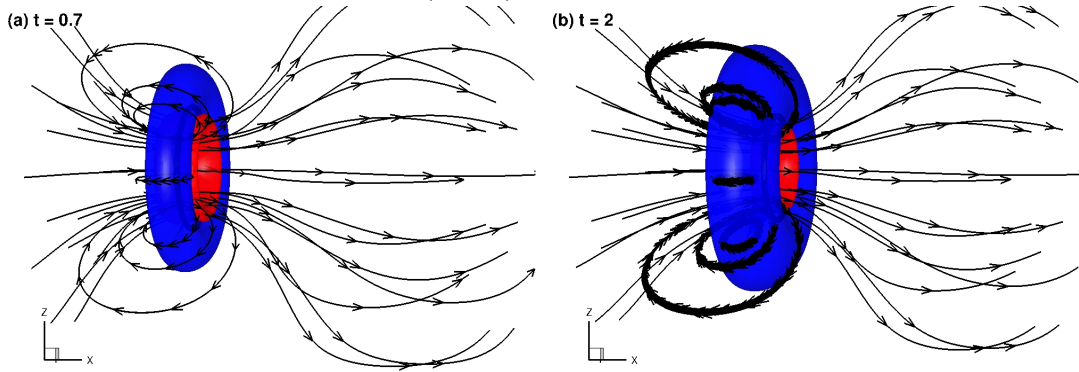


Figure 5.11.: Iso-surface de vorticité du fluide normal et lignes de courant de la vitesse v_n à deux temps différents. Les couleurs correspondent à des valeurs de 0.03 (bleu) et -0.03 (rouge). Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.1$, $\eta_D = 0.05B_{tab}$.

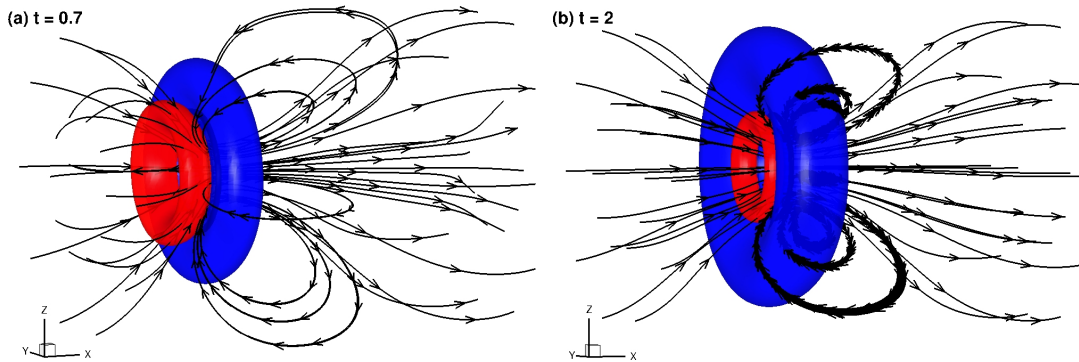


Figure 5.12.: Iso-surface de vorticité du fluide normal et lignes de courant de la vitesse v_n à deux temps différents. Les couleurs correspondent à des valeurs de 0.03 (bleu) et -0.03 (rouge). Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.4$, $\eta_D = 0.035B_{tab}$.

5.4.4. Reconnection de deux anneaux de vortex

La dernière simulation présentée dans ce chapitre est un cas de reconnection correspondant à la collision de deux anneaux de vortex. Cette situation a été simulée par [Inui and Tsubota \(2021\)](#) en utilisant une méthode de filament de vortex, où la reconnection doit être ajoutée de façon phénoménologique. Ici, elle est directement décrite par la dynamique de l'équation de Gross-Pitaevskii. Les résultats obtenus sont présentés en figures [5.13](#) pour le fluide normal et [5.14](#) pour le superfluide. Sur cette image, on voit notamment que la reconnection se fait de façon lisse, sans la coupure introduite par l'échange de branche pour les filaments de vortex. Une simulation avec une valeur plus élevée de B'_{tab} est présentée en figure [5.15](#).

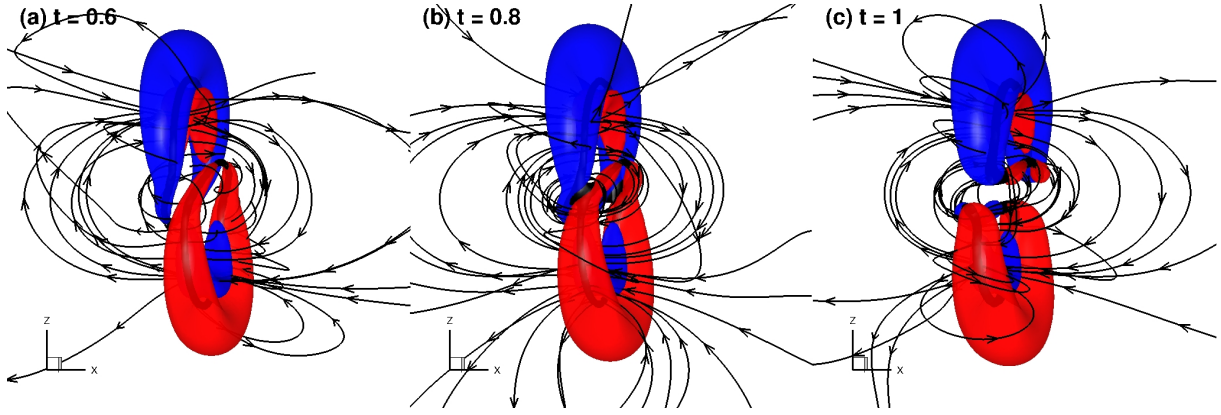


Figure 5.13.: Isosurface de vorticité du fluide normal et lignes de courant de la vitesse $\mathbf{v}_n$ à deux temps différents. Les couleurs correspondent à des valeurs de 0.05 (bleu) et -0.05 (rouge). Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.1$, $\eta_D = 0.05B_{tab}$.

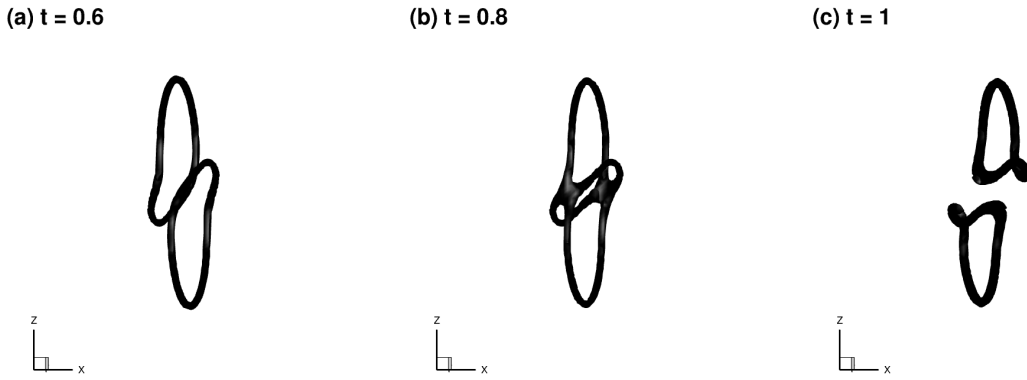


Figure 5.14.: Isosurface de densité du superfluide. Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.4$, $\eta_D = 0.035B_{tab}$.

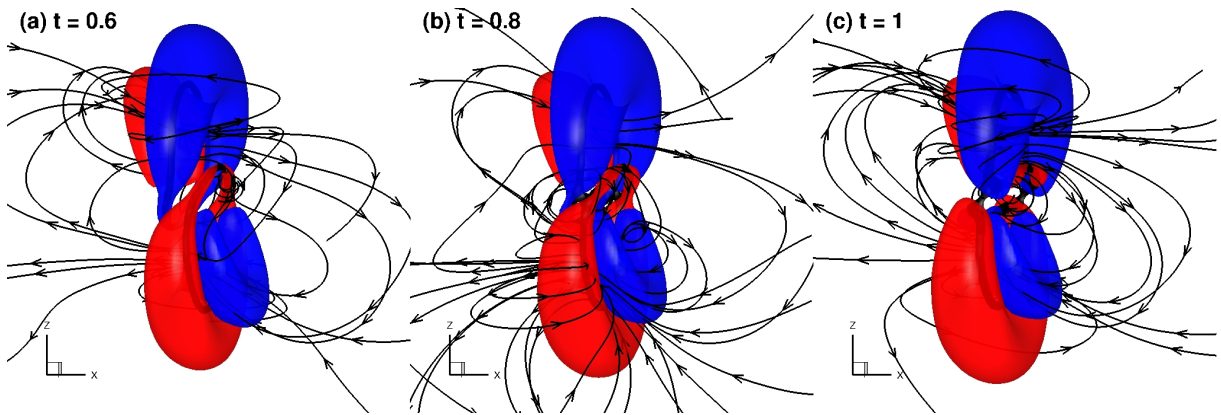


Figure 5.15.: Isosurface de vorticité du fluide normal et lignes de courant de la vitesse $\mathbf{v}_n$ à deux temps différents. Les couleurs correspondent à des valeurs de 0.05 (bleu) et -0.05 (rouge). Les paramètres sont $B_{tab} = 0.4$, $B'_{tab} = 0.4$, $\eta_D = 0.035B_{tab}$.

6. Conclusion et perspectives

J'ai présenté des simulations numériques de plusieurs aspects des fluides quantiques. Une approche par éléments finis avec FreeFem++ a été utilisée dans le cadre des condensats de Bose-Einstein. Pour l'hélium superfluide, il s'agit d'une méthode spectrale codée en Fortran. Le modèle central derrière ces simulations est l'équation de Gross-Pitaevskii.

- Pour l'identification des vortex, nous avons proposé des algorithmes rapides et adaptés à des maillages non réguliers venant de simulations numériques en deux et trois dimensions, ou de visualisations expérimentales. Une utilisation directe des propriétés des vortex permet leur identification à l'échelle du triangle. En deux dimensions, un fit utilisant la bibliothèque IPOPT (Wächter and Biegler, 2006) permet le calcul du rayon des vortex. En trois dimensions, après une étape de traitement nécessaire pour séparer les différentes lignes de vortex, la courbure et le spectre de Kelvin de la ligne sont calculés. Les méthodes proposées ont été testées sur de nombreux cas représentant une grande variété de phénomènes physiques différents (réseau d'Abrikosov, ondes de Kelvin, turbulence quantique, etc.). Les résultats ont été comparés à ceux obtenus par Villois et al. (2016) et valident l'approche utilisée: le gain en temps de calcul est important pour une perte de précision acceptable. Une toolbox FreeFem++ implémentant les algorithmes proposés a été créée et peut facilement être interfacée avec les codes existants utilisant d'autres langages.

Le code pourrait être facilement modifié pour calculer de nouveaux diagnostics ou pour traiter d'autres systèmes décrits par une fonction d'onde complexe, par exemple les supraconducteurs décrits par l'équation de Ginzburg-Landau.

- Pour l'équation de Bogoliubov-de Gennes, nous avons utilisé FreeFem++ pour étudier la stabilité linéaire de différents états stationnaires en une, deux et trois dimensions. Deux codes ont été développés pour calculer dans un premier temps l'état stationnaire grâce à une méthode de Newton, puis dans un second temps les valeurs et vecteurs propres de Bogoliubov-de Gennes. Pour les états complexes en trois dimensions, la parallélisation du code et l'adaptation du maillage sont nécessaires. Ces codes utilisent plusieurs bibliothèques, dont ARPACK (Lehoucq et al., 1998) et SLEPc (Hernández et al., 2003) pour le calcul des valeurs propres, PETSc (Balay et al., 1997) pour la décomposition de domaine, mmg3d (Dapogny et al., 2014; Balarac et al., 2021), parmmg et mshmet pour l'adaptation de maillage. Nous avons validé le fonctionnement des codes par comparaison avec la littérature (Kevrekidis and Pelinovsky, 2010; Middelkamp et al., 2010b; Bisset et al., 2015a). L'étude a été étendue au cas de condensats à deux composantes (Charalampidis et al., 2020; Danaila et al., 2016).

D'un point de vue numérique, l'extension directe de ce travail est l'ajout de continuation par déflation (Farrell et al., 2015). L'utilité de cet algorithme dans l'étude des bifurcations et instabilités entre les différents états des condensats a été montrée par Charalampidis et al. (2018, 2020) et Boullé et al. (2020, 2022). Cet outil transformant le jacobien en une matrice dense, un travail sur l'implémentation (préconditionnement, méthode sans matrice) sera nécessaire pour obtenir de bonnes performances en consommation mémoire.

et en temps. D'un point de vue physique, le code pourrait être utilisé pour calculer le spectre de nombreux états: vortex en S et en U, skyrmions, vortex géants, etc. Les vortex en étoiles et les anneaux de vortex perpendiculaires dont l'expression dans la limite linéaire a été donnée par [Crasovan et al. \(2004\)](#) sont d'autres états qui pourraient être étudiés. Une extension naturelle serait l'étude de condensats de spin à trois composantes où des états tels que les monopôles de 't-Hooft-Polyakov et les anneaux d'Alice qui ont été numériquement observés ([Mithun et al., 2022](#)). Dans un tel système, la prise en compte des interactions dépendant du spin va nécessiter une modification des formulations variationnelles.

- Afin d'étudier l'effet de la friction mutuelle dans l'hélium superfluide, nous avons mis au point un modèle phénoménologique couplant les équations de Gross-Pitaevskii et de Navier-Stokes. Les principales étapes de ce couplage sont le calcul d'une vitesse superfluide régularisée et d'une vitesse de glissement entre les vortex et le superfluide, la formulation de la force de couplage en fonction de cette vitesse de glissement et enfin l'inclusion des termes de couplages dans les deux équations. L'utilisation d'un terme de couplage complexe dans l'équation de Gross-Pitaevskii permet la prise en compte de la composante dissipative de la force de friction. L'intérêt principal de cette approche est la modélisation directe de la reconnection entre les vortex, qui doit être ajoutée de façon phénoménologique dans les modèles utilisant les filaments de vortex. Le couplage a été implémenté dans un code Fortran spectral en utilisant une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 pour l'avancement en temps. Le modèle ne nécessite que trois paramètres numériques à ajuster: un coefficient de régularisation de la vitesse superfluide le long des lignes de vortex, la fréquence du filtre utilisé pour la lisser et un paramètre de dissipation nécessaire pour atténuer les effets compressibles dans le superfluide. Ces trois paramètres ont été fixés par des tests sur des exemples simples (cristal et paire de vortex, vortex ring) où des expressions analytiques existent pour le déplacement des vortex lorsqu'on ne prend en compte que l'influence du fluide normal sur le superfluide ([Barenghi et al., 1983](#)). Une fois les paramètres déterminés, des cas plus complexes ont été étudiés: nous avons retrouvé la structure en trois vortex rings découverte par [Kivotides et al. \(2000\)](#) et les résultats obtenus pour la reconnection de deux vortex rings par [Inui and Tsubota \(2021\)](#) avec les filaments de vortex.

La poursuite de ce travail va consister en l'étude de structures comme le paquet de vortex ring simulé par [Galantucci et al. \(2021\)](#) ou le lien de Hopf étudiés par [Villois et al. \(2020\)](#) et [Proment and Krstulovic \(2020\)](#) pour lequel une détermination de l'influence de la friction mutuelle sur les caractéristiques de la reconnection obtenue dans ces deux articles serait intéressante. Une autre direction possible est la simulation de turbulence quantique avec l'étude de l'influence de la friction sur les cas présentés par [Kobayashi et al. \(2021\)](#) ou la simulation du phénomène de superdiffusion observé par [Tang et al. \(2021\)](#). Étudier l'influence de particules sur le fluide de façon similaire au travail de [Griffin et al. \(2020\)](#) pour le superfluide pourrait être un troisième axe de recherche.

A. Program architecture for the vortex identification toolbox

A.1. Program architecture

Codes and data files forming the vortex identification toolbox are stored in the `Postproc_toolbox` directory. It is organized around three main subdirectories, `postproc_data_2D`, `postproc_data_3D` and `postproc_image_2D`, corresponding to the three algorithms described above: the case of 2D simulation data, that of 3D simulation data and the case of experimental images. Each of these subdirectory contains a file: `FFEM_postproc_$case.edp` which is the main FreeFem++ script file and a folder `A_macro_$case` containing macros used in the main code. For example, to run the vortex identification in 3D simulation data, the user can use the command `FreeFem++ FFEM_postproc_data_3D.edp`. Initial data fields or images for the examples presented in this paper are stored in the `INIT` folder.

The obtained solutions are saved in the folder `dircase`. Depending on the output format selected by the user, data files are generated in specific folders for visualization with Tecplot, Paraview or Gnuplot. We also provide in the folder `Figures` ready-made layouts for Tecplot. The user can thus obtain the figures from this paper using newly generated data. More details about the output structure are given in Sect. [A.4](#).

Before running the main scripts, it could be useful for the reader to get familiar with the initial data fields. This will help with the use of the toolbox in different programming frameworks. For this purpose, we included some auxiliary (optional) scripts that could be used to generate again data files for the examples presented in this paper (folder `extra_codes_for_examples`) or to have an example of how to link an external solver (GP or similar) to the toolbox (folder `data_example`). More in detail:

1. The directory `extra_codes_for_examples` contains codes generating the wave function and computing vortex line properties for the examples described in Sects. [3.6.2](#) to [3.6.4](#):
 - `generate_vortex_knot.edp`: generates the vortex knot wave function (Sect. [3.6.3](#)).
 - `compute_vortex_knot_curvature.edp`: computes numerical and theoretical curvatures for the vortex knot and compares them.
 - `generate_sphere_mesh.edp`: generates a spherical mesh for the BEC example with 12 vortices (Sect. [3.6.2](#)).
 - `generate_Kelvin_wave.edp`: generates the wave function of a vortex line deformed by a Kelvin wave (Sect. [3.6.4](#)).
 - `compute_Kelvin_spectrum.edp`: computes the Kelvin wave spectrum of the vortex line identified in the field file generated by the previous script.

2. The directory `data_example` contains example codes showing how to save numerical data and parameters in the format used in the toolbox:
 - `data_example_2D.f90`: Fortran code computing the wave function of a 2D BEC with three vortices.
 - `data_example_3D.f90`: Fortran code computing the wave function of a 3D BEC with a central vortex line.
 - `convert_data_2D.edp`: FreeFem++script converting the data created by the 2D Fortran code to the FreeFem++format used in the toolbox.
 - `convert_data_3D.edp`: FreeFem++script converting the data created by the 3D Fortran code to the FreeFem++format used in the toolbox.

Going back to main scripts, the complete architecture of the `Postproc_toolbox` main directory is the following:

1. `FFEM_postproc_generate_files.edp` is a FreeFem++script used to automatically run preliminary or maintenance operations: compile auxiliary C++ functions from `Common_Macros`, generate data and mesh used in the presented examples. It is useful to run this script before testing different examples. A `clean` option was also added to help managing data files and results of compilation.
2. The directory `Common_Macros` contains two files:
 - `Macro_common.idp`: macros used to create directories and save the results,
 - `vortextools.cpp`: C++ functions for 2D and 3D cases.
3. The directory `postproc_data_2D` contains codes dedicated to vortex identification in 2D numerical data with the algorithms presented in Sect. 3.2:
 - `FFEM_postproc_data_2D.edp`: the main FreeFem++script.
 - `INIT`: directory containing data and parameter files for the Abrikosov lattice and quartic potential examples described in Sects. 3.2 and 3.6.1.
 - `Figures`: directory containing Tecplot layouts used to replot the figures shown in this article. The main code must be run with the associated example before opening the layout to replot the figure.
 - `A_macro_data_2D`: directory containing macros used for the vortex identification in 2D complex data.
4. The directory `postproc_data_3D` contains codes dedicated to vortex identification in 3D numerical data with the algorithms presented in Sect. 3.4:
 - `FFEM_postproc_data_3D.edp`: the main FreeFem++script.
 - `FFEM_files_for_Kelvin_wave_vortex_knot_lay.edp`: script used to generate the files necessary to replot the figures in Sects. 3.6.3 and 3.6.4.
 - `INIT`: directory containing the data and parameter files for the examples presented in Sects. 3.4, 3.6.2 and 3.6.5: vortex rings in superfluid helium, Bose-Einstein condensate and quantum turbulence. The scripts in the `extra_codes_for_examples` directory must be used to obtain the initial data for the examples described in Sects. 3.6.3 and 3.6.4.
 - `Figures`: directory containing Tecplot layouts used to replot the figures shown in this article. The main code must be run with the associated example before opening the layout to replot the figure. To obtain the curvature and spectrum shown in Figs. 3.6 and 3.7, it is necessary to use the scripts in the `extra_codes_for_examples` directory before opening the layout.
 - `A_macro_data_3D`: directory containing macros used for the vortex identification in 3D complex data.

5. The directory `postproc_image_2D` contains codes dedicated to vortex identification in 2D experimental images with the algorithms presented in Sect. 3.5:
 - `FFEM_postproc_image_2D.edp`: the main FreeFem++ script.
 - `INIT`: directory containing the data files for the vortex lattice presented in Sects. 3.5 and 3.6.6.
 - `Figures`: directory containing Tecplot layouts used to replot the figures shown in this article. The main code must be run with the associated example before opening the layout to replot the figure.
 - `A_macro_image_2D`: directory containing macros used for the vortex identification in 2D experimental images.

A.2. Macros and functions

The different macros and functions used in the toolbox are:

1. The directory `A_macro_data_2D` contains:
 - `M_bec_compute_TF.edp`: macro computing the Thomas-Fermi density ρ_{TF} and condensate radius R_{TF} .
 - `M_bec_fit_gaussian.edp`: macro using Ipopt to fit the vortex density ρ_v with a Gaussian function (see Eq. (3.11)).
 - `M_bec_fit_TF.edp`: macro using Ipopt to fit the Thomas-Fermi density (see Eq. (3.10)).
 - `M_bec_lattice_stats.edp`: macro computing characteristics of the vortex lattice (radius and inter-vortex spacing as a function of the distance to the center of the BEC).
 - `M_bec_read_data.edp`: macro used to read the initial data (wave function field) and parameter files.
 - `M_bec_sort_save_results.edp`: macro used to save the results.
 - `M_bec_vortex_lattice.edp`: macro building a mesh corresponding to the vortex lattice.
 - `M_bec_vortex_regions.edp`: macro computing the vortex position (Eqs. (3.5) and (3.7)) and building the mesh Th_{trunc} .
2. The directory `A_macro_data_3D` contains:
 - `M_bec_build_line.edp`: macro building a vortex line following the method described in Sect. 3.4.
 - `M_bec_compute_curvature.edp`: macro computing the curvature of a vortex line.
 - `M_bec_compute_TF.edp`: macro computing the Thomas-Fermi density ρ_{TF} and condensate radius R_{TF} .
 - `M_bec_read_data.edp`: macro used to read the initial data (wave function field) and parameter files.
 - `M_bec_smooth_line.edp`: macro smoothing a vortex line using a 5-point moving average (see Eq. (3.19)).

3. The directory `A_macro_image_2D` contains:
 - `M_bec_fit_gaussian.edp`: macro using Ipopt to fit the vortex density ρ_v with a Gaussian function (see Eq. (3.11)).
 - `M_bec_fit_TF.edp`: macro using Ipopt to fit the Thomas-Fermi density (see Eq. (3.10)).
 - `M_bec_lattice_stats.edp`: macro computing characteristics of the vortex lattice (radius and inter-vortex spacing as a function of the distance to the center of the BEC).
 - `M_bec_reduces_smooth.edp`: macro used to smooth and lower the resolution of the initial image.
 - `M_bec_regularize_isoline.edp`: macro used to smooth the region borders in ρ_{iso} .
 - `M_bec_sort_save_results.edp`: macro used to save the results.
 - `M_bec_vortex_lattice.edp`: macro building a mesh corresponding to the vortex lattice.
 - `M_bec_vortex_regions.edp`: macro computing the vortex position and building the mesh Th_{trunc} .
4. The `vortextools.cpp` file contains functions used by the previously described scripts and macros:
 - `smoothCurve`: function smoothing a vortex line using a 5-point moving average (see Eq. (3.19)).
 - `uZero`: function computing vortices in a 3D complex field (see Eqs. (3.5) and (3.7)); it returns a P0 function of value 1 if the tetrahedron is crossed by a vortex line and 0 otherwise.
 - `uZero2D`: function computing vortices in a 2D complex field (see Eqs. (3.5) and (3.7)), returns a P0 function of value 1 if the tetrahedron is crossed by a vortex line and 0 otherwise, an array containing vortex positions and d_{min} .
 - `ZeroLines`: function used to identify the vortex lines through the graph described in Sect. 3.4.
 - `curvatureL`: function computing the curvature of a curve described by a line 1D-mesh.
 - `abscisses`: function computing the arc-length along a curve.
 - `interpol`: function using linear interpolation to transform data from an irregular discretization to a uniform one.

A.3. Input parameters

Parameters for the identification process must be adapted in the main code file. They differ depending on the type of data and the space dimension (2D/3D).

(1) In the file `FFEM_postproc_data_2D.edp`, the parameters are:

- **paramread**: defines the method to compute the background density: computes ρ_{TF} from the Gross-Pitaevskii parameters (**true**) or uses the fit presented in Eq. (3.10) (**false**). If **true**, a parameter file must be provided.
- **displayplot**: controls the output information to plot. Possible values from 0 (no plots), to 2 (plots data for all vortices during the fit).
- **save**: if **true**, data used in the Tecplot layouts will be saved.
- **await**: a Boolean indicating if the code must wait for user input when a plot is shown (**true**) or if it can continue (**false**).
- **hole**: a Boolean indicating whether the condensate has a central hole as in the quartic-quadratic potential test case.

- **fcase**: the name of the input file.
- **dirInput**: the name of the directory where the input file is stored.
- **dircase**: the name of the directory where the results will be stored.

(2) In the file `FFEM_postproc_data_3D.edp`, the parameters are:

- **BEC**: if **true**, the tetrahedrons outside the Thomas-Fermi zone will be removed. In this case, a parameter file must be given.
- **displayplot**: controls the output information to plot. Possible values from 0 (no plots), to 2 (plots data for all vortices during the fit).
- **save**: if **true**, data will be saved in the **Tecplot** folder.
- **await**: a Boolean indicating if the code must wait for user input when a plot is shown (**true**) or if it can continue (**false**).
- **curv**: the vortex line curvature is computed if **true**.
- **npadd**: the number of points to add on each segment of the line before smoothing. The minimum is 1 (the extremity of the segment).
- **smooth**: a Boolean indicating whether to smooth the line or not.
- **nsmooth**: the number of smoothing iterations.
- **fcase**: the name of the input file.
- **dirInput**: the name of the directory where the input file is stored.
- **dircase**: the name of the directory where the results will be stored.

(3) In the file `FFEM_postproc_image.edp`, the parameters are:

- **displayplot**: controls the output information to plot. Possible values from 0 (no plots), to 2 (plots data for all vortices during the fit).
- **save**: if **true**, data will be saved in the **Tecplot** folder.
- **await**: a Boolean indicating if the code must wait for user input when a plot is shown (**true**) or if it can continue (**false**).
- **reduces**: a Boolean, the image resolution is reduced when the value is **true**.
- **fcase**: the name of the input file.
- **dirInput**: the name of the directory where the input file is stored.
- **dircase**: the name of the directory where the results will be stored.
- **cutisoval**: value c_{iso} used when separating the regions.
- **cutisoval2**: a second value $c_{iso,2}$ used when separating the regions.

A.4. Outputs

When a computation starts, the `OUTPUT_$case` directory is created. It contains five folders. The `RUNPARAM` directory contains a copy of the code and data files, allowing an easy identification of each case and preparing an eventual rerun of the same case. The other folders contains different output format files of the computed solution, to be visualised with Tecplot, Paraview, Gnuplot or FreeFem++. The content of those subfolders depends on the case and on the computation parameters:

- For 2D data, the `Gnuplot` folder contains multiple files. Computed quantities are stored in the `vortex_coord_$case.dat` file. The column are in order: the vortex number, the vortex coordinates x_v and y_v , the radius, the distance from the center of the BEC and a boolean indicating if Ipopt has converged (value 0) or not (value 1) when fitting the vortex. The `sorted_radius.dat` and `stats_lattice.dat` contain respectively the core radius and the inter-vortex distance (second column) sorted by increasing distance to the center of the condensate (first column). The `Tecplot` folder contains files for the initial density (`rhoinit.dat`), the background density (`rhoTF.dat`), the vortex wave function on the whole domain (`rhov.dat`) and only on vortex regions (`rhovVortex.dat`), as well as meshes for the Thomas-Fermi border of the condensate (`TF_meshL.dat`) and the estimated vortex points (`vortex_mesh.dat`).
- For 3D data: The smoothed vortex lines are stored as `.vtk` files in the `Paraview` folder, as FreeFem++ `.meshb` files in the `meshL` folder and as `.dat` files in the `Gnuplot` folder (as a succession of point coordinates x, y, z). The file names are `line_` followed by `fcase` and the line number. Files starting by `zeroline` in the `Gnuplot` and `Paraview` folders are the vortex lines before smoothing. The `Tecplot` folder contains the initial density (`rho_init.dat`), a mesh of the tetrahedrons crossed by vortex lines (`vortex_mesh.dat`) and if it is computed, the Thomas-Fermi density (`rho_TF.dat`). If the curvature is computed, it is saved in the `Gnuplot` folder as `curv_` followed by the line number.
- For experimental images, the `Gnuplot` and `Tecplot` folders are almost the same as in the 2D data case. The only difference is that there are two meshes built from vortex points: the first one uses the points estimated from the vortex regions (`vortex_mesh_estimated.dat`) and the second one uses vortex positions obtained from the fit with a Gaussian (`vortex_mesh_fitted.dat`).

B. Program architecture for the BdG toolbox

B.1. Program architecture

Codes and data files forming the BdG toolbox are stored in the `FFEM_BdG_toolbox` directory. It is organized around two main subdirectories, `BdG_1comp` and `BdG_2comp`, corresponding to the one and two component codes. Each of these subdirectory contains two main files: *FFEM_GP_\$case_1D_2D_3D.edp*, which is the main FreeFem++ script file for the computation of the stationary state, and *FFEM_BdG_\$case_1D_2D_3D.edp* which is the main FreeFem++ script file for the computation of the BdG eigenvalues. For example, to run the computation of a one component stationary state, the user can use the command `FreeFem++ FFEM_GP_$case_1D_2D_3D.edp`. BdG eigenvalues can then be computed with the command `FreeFem++ FFEM_BdG_$case_1D_2D_3D.edp`. Parameter files for the examples presented in this paper are stored in the `INIT` folder.

The obtained solutions are saved in the `dircase` directory. Depending on the output format selected by the user, data files are generated in specific folders for visualization with Tecplot, Paraview or Gnuplot. We also provide in the folder `Figures` ready-made layouts for Tecplot. The user can thus obtain the figures from this paper using newly generated data. More details about the output structure are given in Sect. B.4.

The parallel code shares the architecture of the sequential one, with the main directory being named `FFEM_BdG_toolbox_ddm`. The only differences are macros in the `A_macro` dedicated to the parallelization of the code, and a *FFEM_LL2c_1D_2D_3D.edp* script in the `BdG_1comp` folder that computes the linear limit states for the second component (see Eq. (4.21)). In the two component codes, two continuations are used: the first one on μ_1 and μ_2 , the second one on β_{12} and β_{21} .

The complete architecture of the `BdG_1comp` directory is the following (the architecture of the `BdG_2comp` directory is almost identical):

1. *FFEM_GP_\$case_1D_2D_3D.edp*: the main script for the computation of the GP stationary states.
2. *FFEM_BdG_\$case_1D_2D_3D.edp*: the main script for computing the eigenvalues.
3. *param_num_common.inc*: a parameter file for the main numerical parameters.
4. `INIT`: directory storing the parameter files for the examples presented in Sects. 4.5 and 4.6.
5. `Figures`: directory containing Tecplot layouts used to replot the figures shown in Sects. 4.5 and 4.6. The main code must be run with the associated example before opening the layout to replot the figure. For some examples, it is necessary to run the case with different parameters (e.g. with and without mesh adaptation) before opening the layout.
6. `A_macro`: directory containing macros used in the main scripts.

B.2. Macros and functions

The different macros and functions used in the toolbox are stored in the `A_macro` folders and are for the sequential code:

- *Macro_BdGsolve.edp*: macro computing the BdG eigenvalues from the matrices described by Eqs. (4.44) and (4.46).
- *Macro_createdir.edp*: macro creating the file structure of the `dircase` folder.
- *Macro_GPsolve.edp*: macro computing the GP stationary state with a Newton method (see Eqs. (4.34) and (4.39)).
- *Macro_meshAdapt.edp*: macro adapting the mesh to the wavefunction.
- *Macro_operator.edp*: definitions of useful macros and functions: gradients, energy (2.18), chemical potential (2.26), Hermite polynomials, etc. Also contains a macro creating a spherical mesh for the 3D problems.
- *Macro_output.edp*: macros used to save data in Tecplot and Paraview formats.
- *Macro_plotEigenvector.edp*: macro plotting the real and imaginary parts of a BdG eigenvector.
- *Macro_plotphi.edp*: macro plotting the complex wavefunction. The letter "k" can be pressed to alternate between plots of the density, phase and real and imaginary parts of the wavefunction.
- *Macro_problem.edp*: definitions of the variational formulations for the GP and BdG problems (Eqs. (4.34) and (4.44) or (4.39) and (4.46)).
- *Macro_restart.edp*: macros used to save and load the wavefunction to or from FreeFem++ files.
- *Macro_saveData.edp*: macro saving the stationary wavefunction.
- *Macro_saveEigenvalues.edp*: macro saving the BdG eigenvalues and eigenvectors.

Additional macros for the parallel code are:

- *Macro_globalpartition.edp*: macro distributing the mesh and variables on all cores.
- *Macro_onedomainisol.edp*: macro gathering a distributed variable on a single core.
- *Macro_LL2csolve.edp*: macro solving the Schrödinger equation (4.21) to obtain linear limit states for the second component.
- *Macro_saveEigenvaluesLL2c.edp*: macro saving the linear limit eigensates for the the second component.

B.3. Input parameters

Parameters are separated in two files. *param_num_common.inc* contains numerical parameters used in all computations. Files in the `INIT` directory specify physical parameters describing the state that will be studied during a computation and numerical parameters specific to this problem. The examples distributed with the toolbox provide a variety of examples that can be used as a starting point when selecting parameters for the study of new states.

(1) In the file `param_num_common.inc`, the parameters are:

- **displayplot**: controls the output information to plot. Possible values from 0 (no plots), to 2 (plots data at all iterations of the Newton method and all eigenvectors computed by the BdG code).
- **await**: a Boolean indicating if the code must wait for user input when a plot is shown (**true**) or if it can continue (**false**).
- **cutXY**: a Boolean indicating whether to plot cuts of the wavefunction along the z axis.
- **cutXZ**: a Boolean indicating whether to plot cuts of the wavefunction along the y axis.
- **cutYZ**: a Boolean indicating whether to plot cuts of the wavefunction along the x axis.
- **savecut**: a Boolean indicating whether to save the cuts of the wavefunction along the different axes.
- **Tecplot**: a Boolean indicating whether to save data in the Tecplot format.
- **Paraview**: a Boolean indicating whether to save data in the Paraview format (only in 2D and 3D).
- **FF**: a Boolean indicating whether to save the eigenvectors as FreeFem++ mesh and variable files.
- **adaptinit**: a Boolean indicating whether to recompute the initial solution after the first mesh adaptation.
- **adaptmeshFF**: a Boolean indicating whether to use mesh adaptation.
- **shift**: a Boolean indicating whether to use a shift when computing the BdG eigenvalues (see Eq. (4.50)).
- **Nadapt**: if mesh adaptation is used, the mesh is adapted every **Nadapt** iterations during the continuation.
- **Nplot**: the wavefunction is plotted every **Nplot** iterations during the continuation.
- **Nsave**: the wavefunction is saved every **Nsave** iterations during the continuation.

(2) In the file `$case.inc`, stored in the INIT directory, the parameters are:

- General parameters for the case:
 - **dimension**: the dimension of the problem (1, 2 or 3).
 - **FEchoice**: the type of finite element used. Usually $P2$.
 - **nev**: the number of eigenvalues computed by the BdG code.
- Parameters used to restart a computation:
 - **restart**: a boolean indicating if the initial solution is a restart from a previous computation.
 - **murestart**: the initial value of μ in the case of a restart.
 - **fcaserestart**: the folder where the initial solution is stored in the case of a restart.

- Parameters of the continuation :
 - **kpol**, **lpol**, **mpol**: integers defining the initial state in the linear limit.
 - **startmu**: the initial value of μ .
 - **endmu**: the final value of μ .
 - **dmu**: the increment in μ during the continuation.
 - **facmu**: when using the linear limit, the initial value of μ is given by **facmu** $\cdot \mu_{|klm\rangle}$.
- Coefficients of the GP equation :
 - **beta**: the nonlinear coefficient, usually 1.
 - **ax**, **ay**, **az**: the frequencies of the trapping potential along the different axes.
 - **a4**: the quartic coefficient of the potential.
 - **Ctrap**: a function defining the trapping potential.
- Parameters for the mesh creation :
 - **Dx**: the distance between points on the mesh border.
 - **scaledom**: a coefficient used to control the size of the domain: the mesh radius is given by **Rdom** = **scaledom** r_{TF} where r_{TF} is the Thomas-Fermi radius.
 - **createMesh**: a macro creating the initial mesh **Th** (or **ThBackup** in the parallel code).
- Parameters for the mesh adaptation :
 - **errU**: the interpolation error level.
 - **hmin**: the minimum length of a mesh element edge in the new mesh.
 - **hmax**: the maximum length of a mesh element edge in the new mesh.
 - **adaptratio**: the ratio for a prescribed smoothing of the metric. No smoothing is done if the value is less than 1.1.
- Parameters for the initial solution :
 - **initname**: the name given to the initial solution.
 - **initcond**: a macro defining the initial solution in the **phi** variable (or **phiBackup** in the parallel code).
- Definitions of the boundary conditions :
 - **BCGP**: the boundary conditions used in the GP code for Eqs. (4.34) and (4.39).
 - **BCBdG**: the boundary conditions used in the BdG code for Eqs. (4.44) and (4.46).
 - **BCLL2c**: the boundary conditions used in the code for the linear limit of the second component (Eq. 4.21). Only used in the parallel code.
- Parameters for the output directory :
 - **fcase**: the name given to the current computation.
 - **dircase**: the directory where the results will be stored.

(3) In a two component case, some new parameters are defined in the `$case.inc` file:

- Parameters used to restart a computation:
 - **mu1restart**, **mu2restart**: the initial value of μ_1 and μ_2 in the case of a restart.
 - **beta12restart**, **beta21restart** the initial value of β_{12} and β_{21} in the case of a restart.
- Parameters of the continuation :
 - **startmu1**, **startmu2**: the initial value of μ_1 and μ_2 .
 - **endmu1**, **endmu2**: the final value of μ_1 and μ_2 .
 - **dmu1**, **dmu2**: the increments in μ_1 and μ_2 during the continuation.
 - **startbeta12**, **startbeta21**: the initial value of β_{12} and β_{21} .
 - **endbeta12**, **endbeta21**: the final value of β_{12} and β_{21} .
 - **dbeta12**, **dbeta21**: the increments in β_{12} and β_{21} during the continuation.
- Coefficients of the GP equation :
 - **beta11**, **beta12**: the nonlinear coefficients β_{11} and β_{22} .
- Parameters for the initial solution :
 - **initname1**: the name given to the initial solution for the first component.
 - **initname2**: the name given to the initial solution for the second component.
 - **initcond**: a macro defining the initial solution in the `[phi1,phi2]` variable (or `[phi1Backup,phi2Backup]` in the parallel code).

B.4. Outputs

When a computation starts, the `OUTPUT_$case` directory is created. It contains up to eight folders. The `RUNPARAM` directory contains a copy of the code and data files, allowing an easy identification of each case and preparing an eventual rerun of the same case. The other folders contains different output format files of the computed solution, to be visualised with Tecplot, Paraview, Gnuplot or FreeFem++. The content of those subfolders depends on the case and on the computation parameters (differences in the two component code are given in parenthesis):

1. The `Gnuplot` folder contains two files:
 - Informations about the stationary states are stored in the `GP_results.dat` file. The column are in order: the non-linear coefficient β (β_{12} and β_{21}), the imposed chemical potential μ (μ_1 and μ_2), the number of Newton iterations used for this value of μ , the errors (4.47) and (4.48), the computed value of the chemical potential given by Eq. (2.26) (computed values of μ_1 and μ_2), the number of atoms (2.13) (the number of atoms in the two components), the GP energy (2.18), the mesh size, the number of degrees of freedom and the cpu time used to compute the stationary state.
 - BdG eigenvalues are stored in the `BdG_results.dat` file. The column are in order: the non-linear coefficient β (β_{12} and β_{21}), the imposed chemical potential μ (μ_1 and μ_2), the eigenvalue number between 0 and **nev**, the real and imaginary part of the eigenvalues, the Krein signature and its sign (the Krein signature and its sign for the two components), the residual (4.49) and the cpu time used to compute the eigenvalues.
2. The `Paraview` folder contains the wavefunctions stored as `.vtk` or `.vtu` and `.pvd` files:
 - `phi_init.vtu` and `phi_final.vtu` are the initial and final solutions.
 - `phi_mu_$mu.vtu` contains the stationary wavefunction for a given value of μ .
 - `phi_mu1_$mu1_mu2_$mu2.vtu` contains the stationary wavefunction for given values of μ_1 and μ_2 in the first continuation.
 - `phi_beta12_$beta12_beta21_$beta21.vtu` contains the stationary wavefunction for given values of β_{12} and β_{21} in the second continuation.

3. The `Paraview_Eigenvectors` folder contains the eigenvectors stored as:
 - `eVec_mu_$mu_$nev.vtu` in the one component code.
 - `eVec_beta12_$beta12_beta21_$beta21_mu1_$mu1_mu2_$nev.vtu` in the two component code.
4. The `RST` folder contains the stationary states stored as FreeFem++ files. The names are:
 - `RST-$mu.rst` or `RST-$mu1-$mu2-$beta12-$beta21.rst` for the data.
 - `RSTTh-$mu` or `RSTTh-$mu1-$mu2-$beta12-$beta21` for the mesh files. The file extensions are `.mesh` (in 1D), `.msh` (in 2D) or `.meshb` (in 3D).
5. The `Tecplot` folder contains the wavefunctions stored as `.dat` Tecplot files:
 - `phi_init.dat` and `phi_final.dat` are the initial and final solutions.
 - `phi_mu_$mu.dat` contains the stationary wavefunction for a given value of μ .
 - `phi_mu1_$mu1_mu2_$mu2.dat` contains the stationary wavefunction for given values of μ_1 and μ_2 in the first continuation.
 - `phi_beta12_$beta12_beta21_$beta21.dat` contains the stationary wavefunction for given values of β_{12} and β_{21} in the second continuation.
6. The `Tecplot_Eigenvectors` folder contains the eigenvectors stored in the Tecplot format:
 - `eVec_mu_$mu_$nev.dat` in the one component code.
 - `eVec_beta12_$beta12_beta21_$beta21_mu1_$mu1_mu2_$nev.dat` in the two component code.
7. The `Tecplot_Eigenvalues` folder contains the eigenvalues stored in the Tecplot format. Filenames are `BdG_results_$i.dat`. Each file contains the i -th smallest eigenvalue for each value of μ (or β_{12} in the two component code).

C. Program architecture for the Gross-Pitaevskii and Navier-Stokes coupling code

The GPS (Gross-Pitaevskii Simulator) code has been created by [Parnaudeau et al. \(2015\)](#). It is a Fortran code parallelized with MPI and OpenMP in a slab or stencil decomposition (see Fig. C.1). Spectral and pseudo-spectral methods are used to solve the stationary and time dependant Gross-Pitaevskii equation. To follow the notations used in the code, the Navier-Stokes velocity will be denoted in this appendix as $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)^T$. The symbol for the Fourier transform is $\mathcal{F}$ and variables in Fourier space are written with a ^ sign. For high-resolution 3D simulations, output files are created using the Adaptable IO System (ADIOS) library ([Liu et al., 2014](#)). The grids used in the simulations presented in section 5 are cubes of side 2π and the number of points along each direction is 256 in 2D and 128 in 3D.

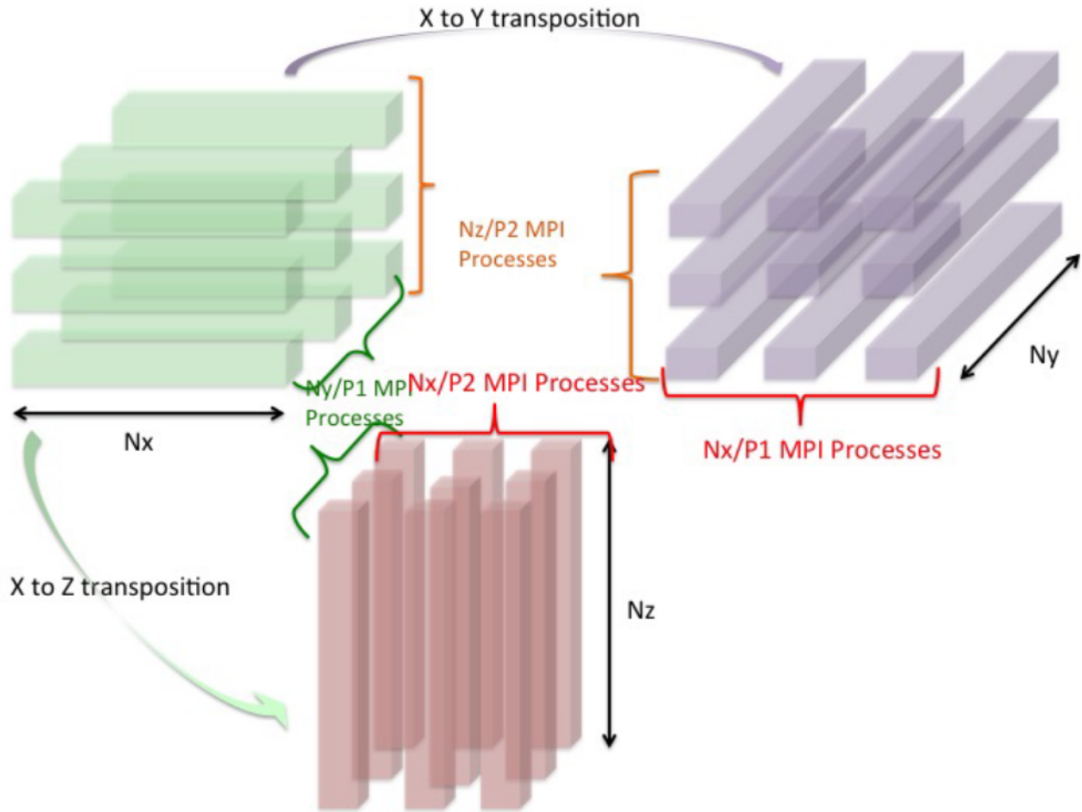


Figure C.1.: Stencil decomposition used in GPS ([Parnaudeau et al., 2015](#)).

We have modified this code to implement our model with a 4th order Runge Kutta (RK4) method for the time advancement. In the following descriptions, I will only present files and functions relevant to:

- The computation of initial solutions for the superfluid wavefunction by solving the ARGLE equation (5.60) with an Euler scheme.
- The computation of the Gross-Pitaevskii (GP) time dynamic.
- The computation of the Navier-Stokes (NS) time dynamic.
- The computation of the full Navier-Stokes and Gross-Pitaevskii (NSGP) coupled dynamic with the RK4 scheme described in section 5.3.3.

C.1. Program architecture

The code is organized around a number of files:

- *GPS_main.f90*: the main code.
- *GPS_var_def.f90*: definitions of various variables and constants.
- *GPS_allocation.f90*: definitions and allocations of arrays for the wavefunction, velocity and vorticity fields, etc.
- *GPS_communication.f90*: initialization and parallelization of the simulation grid.
- *GPS_compute_fft.f90*: initialization of vectors describing the physical and Fourier space discretizations: x, y, z and k_x, k_y, k_z .
- *GPS_compute_lap_rot_fft.f90*: computation of gradients and rotation terms $(\mathbf{v} \cdot \nabla)\psi$ using the Fourier domain.
- *GPS_IO_config.f90*: reading the input parameters in the *GPS_input_\$case.init* file.
- *GPS_initial_conditions.f90*: definition of initial conditions for the wavefunction and the Navier-Stokes velocity fields.
- *GPS_model_imaginary_time.f90*: solvers for the time-independant GP problem (using an imaginary time method) and the ARGLE equation.
- *GPS_model_unstationary.f90*: numerical methods for the time-dependant GP equation using a Strang splitting or RK4.
- *GPS_NS_utils.f90*: useful functions for the NS and NSGP solvers (computation of the superfluid velocity, the vorticity, projection on divergence-free functions, dealiasing).
- *GPS_NS_solver.f90*: solver for the NS and NSGP problems.
- *GPS_compute.f90*: computation of diagnostics: energies, spectrums, etc.
- *GPS_IO.f90*: creation of output and backup files.

C.2. Main functions

The main functions for the model are:

1. In *GPS_initial_conditions.f90*: the different initial conditions are:
 - **Init_NS**: initial conditions for the normal velocity field. Possibilities are an imposed constant velocity, a random field and a Taylor-Green vortex defined as:

$$u_x = \sin(x) \cos(y) \cos(z), \quad (\text{C.1})$$

$$u_y = -\cos(x) \sin(y) \cos(z), \quad (\text{C.2})$$

$$u_z = 0. \quad (\text{C.3})$$

- **VR1**: creates a vortex ring of prescribed position and radius in the superfluid. The vortex ring is built by rotating the Padé approximant (2.50). Details of the procedure are described in Kobayashi et al. (2021).
- **VR2**: creates two vortex rings with opposite signs with prescribed positions and radius in the superfluid.
- **VRbundle**: creates a bundle of vortices in the superfluid (see Galantucci et al. (2021)).
- **VRpairTanh**: creates a 2D vortex pair (see section 5.4.2) at prescribed coordinates (defined in *GPS_IO_config.f90*) following Eq. (5.98).
- **VRpairExp**: creates a 2D vortex pair (see section 5.4.2) at prescribed coordinates (x_v, y_-) and (x_v, y_+) (defined in *GPS_IO_config.f90*). Phase defects are created by the following initial solution:

$$\psi_{\text{pair}} = \begin{cases} \exp\left(\frac{2i\pi}{L_x}x\right) & \text{if } y_- < y < y_+, \\ 1 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

An ARGLE step with the advection velocity given by Eq. (5.93) is necessary to obtain the vortex pair.

- **VRcristal**: creates a cristal of vortices in the superfluid (see section 5.4.1) as:

$$\psi_{\text{cristal}} = \frac{1}{2} \left(\cos\left(\frac{2i\pi}{L_x}x\right) + i \cos\left(\frac{2i\pi}{L_y}y\right) \right). \quad (\text{C.5})$$

An imaginary time method is used to reach the cristal state.

- **TG**: creates a superfluid field with a velocity close to a Taylor-Green field. ARGLE steps are necessary to obtain the stationary solution (Kobayashi et al., 2021).
 - **ABC**: creates a superfluid field with a velocity close to an Arnold-Beltrami-Childress field. ARGLE steps are necessary to obtain the stationary solution (Kobayashi et al., 2021).
2. In *GPS_NS_utils.f90*: the NS and NSGP solvers use the following functions:
 - **setup_dealiasing**: setups the dealiasing (following the $\frac{2}{3}$ rule) and the Gaussian smoothing filters.
 - **use_filter_3c**: applies a filter in Fourier space on a velocity field.
 - **use_filter_1c**: applies a filter in Fourier space on a wavefunction.
 - **calc_div**: computes the divergence of a velocity field.
 - **vecprod**: computes the vector product of two fields in physical space.
 - **compute_us**: computes the superfluid velocity following Eq. (5.20).
 - **calc_curl**: computes the curl of a field (used to evaluate the vorticity).
 - **project_uk**: projects a field on the divergence free function space by applying the Π operator (see Eq. (5.74)) in Fourier space.

Algorithm 4 : Projection on divergence-free functions: `project_uk`

Data : $\hat{u}_x, \hat{u}_y, \hat{u}_z$
Result : $\hat{u}_x, \hat{u}_y, \hat{u}_z$
 $wvn \leftarrow k_x^2 + k_y^2 + k_z^2;$
 $rlap \leftarrow \frac{i}{wvn + 10^{-20}} (k_x \hat{u}_x + k_y \hat{u}_y + k_z \hat{u}_z);$
 $\hat{u}_x \leftarrow \hat{u}_x - i k_x rlap;$
 $\hat{u}_y \leftarrow \hat{u}_y - i k_y rlap;$
 $\hat{u}_z \leftarrow \hat{u}_z - i k_z rlap;$

3. In *GPS_NS_solver.f90*: the NS and NSGP solvers use the following functions:
 - **calc_nlk_NS**: computes the $\mathbf{G}$ term in the NS equation (5.74) (first part of Alg. 2).
 - **compute_u_adv_Fns**: computes the slip velocity $\mathbf{v}_{slip}$ and the friction force $\mathbf{F}_{ns}$ (Eqs. (5.58) and (5.40), algorithm 1).
 - **NSGP_model_RKImp**: main function for the NSGP solver.
4. In *GPS_model_unstationary.f90*: the functions used to compute the dynamic of the Gross-Pitaevskii wavefunction:
 - **calc_nlk_Lap_GP**: computes the right hand side term of the GP equation (5.67) for the NSGP solver (second part of Alg. 2).
5. In *GPS_model_imaginary_time.f90*: the functions used to compute stationary solutions of the GP equation.
 - **model_EI**: implicit Euler method for the ARGLE equation. The velocity field is given by Eqs. (5.93) or (5.102).
 - **compute_rhs_RKCN**: computes the explicit part of the right-hand side of the ARGLE equation (variable `rhs` in algorithm 5).

Algorithm 5 : Implicit Euler method for the ARGLE equation: `model_EI`

Data : ψ, U^{adv}
Result : ψ
 $V \leftarrow \frac{(U^{adv})^2}{4\alpha} - \beta;$
 $rhs \leftarrow (-V - \beta|\psi|^2)\psi - iU^{adv} \cdot \nabla\psi$ /* given by **compute_rhs_RKCN** */;
 $\hat{\psi} \leftarrow \mathcal{F}(\psi);$
 $\hat{\psi} \leftarrow \frac{\hat{\psi} + \delta t \text{ rhs}}{1 - \alpha \delta t k^2};$
 $\psi \leftarrow \mathcal{F}^{-1}(\hat{\psi});$

6. In *GPS_compute.f90*: various functions for storing backups, outputs and diagnostics:
 - **compute_energy_GP**: computes diagnostics for the GP equation (energy (2.11), vortex positions, etc.).
 - **compute_energy_NS**: computes the NS energy (5.17).
 - **calc_positionNewton2D**: Newton method to track vortex positions in 2D .
7. In *GPS_IO.f90*: various functions computing and storing backups, outputs and diagnostics:
 - **backup**: stores the wavefunction and the normal velocity in a backup file.
 - **output**: stores $\psi, |\psi|^2, S, \mathbf{v}_s, \mathbf{v}_s^{reg}, \omega_s, \mathbf{v}_{slip}, \mathbf{v}_n, \omega$ in a file (in Paraview or Adios format).
 - **output_tecplot**: stores $\psi, |\psi|^2, S, \mathbf{v}_s, \mathbf{v}_s^{reg}, \omega_s, \mathbf{v}_{slip}, \mathbf{v}_n, \omega$ in a Tecplot file.

C.3. Input parameters

Parameters are selected in the `GPS_input_$case.init` file. They are:

- Discretization parameters:
 - **Nx, Ny, Nz**: the number of points along each direction (x , y and z).
- Geometry parameters:
 - **xmin, xmax, ymin, ymax, zmin, zmax**: the size of the domain, usually 0 and 2π .
- NSGP parameters:
 - **timescheme**: the time stepping scheme. The only implemented method is **RK4Imp**.
 - **dt**: the time step.
 - **initsolNS**: the initial solution for the NS velocity.
 - **initsolGP**: the initial solution for the GP wavefunction.
 - **nu**: the normal fluid viscosity.
 - **filterNS**: a Boolean indicating whether to use the dealiasing filter for the normal fluid (defaults to **true**).
 - **filterGP**: a Boolean indicating whether to use the dealiasing filter for the superfluid (defaults to **true**).
 - **Btab**: the B_{tab} coefficient.
 - **Bptab**: the B'_{tab} coefficient.
 - **rhon**: the normal fluid density.
 - **rhos**: the superfluid density.
 - **unin, vnin, wnin**: the initial normal fluid velocity if it is constant.
 - **dvor**: the initial distance between the vortices (only for the vortex pair).
 - **etadiss**: the dissipation parameter η .
 - **cspeed**: the speed of sound.
 - **xi**: the healing length.
 - **beta**: the nonlinear coefficient.
 - **alpha**: the Laplacian coefficient.
 - **kMFPE**: the value of the smoothing parameter k^{reg} .
- IO parameters:
 - **output**: a Boolean indicating whether to save data in output files.
 - **tecplot**: a Boolean indicating whether to save data in the Tecplot format.
 - **paraview**: a Boolean indicating whether to save data in Paraview files.
 - **adios**: a Boolean indicating whether to save data in Adios files.
 - **freqbackup**: the frequency at which backup files are stored.
 - **energy**: a Boolean indicating whether to save the time evolution of the energies (and other parameters: mass, vortex positions, etc.).
 - **sfp**: a Boolean selecting whether to save backup files for each iterations.

- Time and restart parameters:
 - **itermax**: the total number of iterations.
 - **restart**: a Boolean indicating if the computation is a restart from a previous one (value 1) or not (value 0). If it is set to -1 , only one variable is read in a restart file.
 - **restartGP**: a Boolean indicating if the superfluid wavefunction is a restart from a previous computation.
 - **restartNS**: a Boolean indicating if the normal velocity is a restart from a previous computation.
 - **dirbackupGP**: the directory where the initial solution is stored for a GP restart.
 - **dirbackupNS**: the directory where the initial solution is stored for a NS restart.
 - **dirbackupNSGP**: the directory where the initial solution is stored for a NSGP restart.

They are two possibilities when selecting the coefficients of the Gross-Pitaevskii equation: the coefficients can either be given directly (**alpha** and **beta**) or they can be computed through Eq. 5.84 from the speed of sound **cspeed** and the healing length **xi**.

C.4. Outputs

When a computation starts, the **results_\$case** directory is created. It contains multiple folders:

1. The **src** folder contains copies of the **GPS_input_\$case.init** files.
2. The **paraview** directory contains the outputs as *.vtk* files. There is one file per core stored every **freqbackup** iterations. The name of the files are **GPS_results_\$i_\$j.vtk** where i denotes the output iteration and j identifies the core. A *.pvd* file is built for an easy visualisation of the whole data.
3. The **adios** directory contains the outputs stored as ADIOS *.bp* files under the name **GPS_results_\$i.bp** where i denotes the output iteration. They can be transformed to hdf5 files with the **bp2h5** command.
4. The **backup** directory contains backups (containing only the wavefunction and the normal fluid velocity). Two possibilities exists:
 - If ADIOS is not used, files are stored using a Fortran unformatted binary format under the name **alltab_mpi.backup** (if MPI is used) or **alltab_openmp.backup** (if MPI is not used). Parameters for the computation are stored in **alltab_param.backup**.
 - If ADIOS is used, backups are stored as *.bp* files under the name **GPS_result_backup.bp**. Parameters for the computation are stored in **alltab_param.backup**.
 In both cases, if the **sfp** parameter is true, **GPS_result** and **alltab_** are replaced with **GPS_result_sfp_\$i** and **alltab_sfp_\$i** for the i -th backup file so that new backups are stored in a new file rather than erasing the previous one.
5. The **Tecplot** folder contains the output variables stored in a Tecplot *.tec* file as **GPS_result_\$i** where i denotes the output iteration.
6. The **Gnuplot** folder contains text files storing the diagnostics computed in *GPS_compute.f90*: GP and NS energies, the mass, the vortex positions, etc.

Bibliographie

- Abo-Shaeer, J.R., Raman, C., Vogels, J.M., Ketterle, W., 2001. Observation of vortex lattices in Bose-Einstein condensates. *Science* 292, 476–479.
- Abrikosov, A.A., 1957. On the magnetic properties of superconductors of the second group. *Sov. Phys. JETP* 5, 1174–1182.
- Adachi, H., Fujiyama, S., Tsubota, M., 2010. Steady-state counterflow quantum turbulence: Simulation of vortex filaments using the full Biot-Savart law. *Phys. Rev. B* 81, 104511.
- Aftalion, A., Danaila, I., 2003. Three-dimensional vortex configurations in a rotating Bose-Einstein condensate. *Physical Review A* 68, 023603.
- Allen, J.F., Misener, A.D., 1938. Flow of Liquid Helium II. *Nature* 141, 75–75.
- Anderson, M.H., Ensher, J.R., Matthews, M.R., Wieman, C.E., Cornell, E.A., 1995. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science* 269, 198–201.
- Antoine, X., Duboscq, R., 2014. GPELab, a Matlab toolbox to solve Gross–Pitaevskii equations I: Computation of stationary solutions. *Computer Physics Communications* 185, 2969–2991.
- Auliac, S., 2014. Développement d’outils d’optimisation pour FreeFem++. Theses. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI.
- Baggaley, A.W., 2012. The sensitivity of the vortex filament method to different reconnection models. *Journal of Low Temperature Physics* 168, 18–30.
- Baggaley, A.W., Barenghi, C.F., 2011. Vortex-density fluctuations in quantum turbulence. *Phys. Rev. B* 84, 020504.
- Balarac, G., Basile, F., Benard, P., Bordeu, F., Chapelier, J.B., Cirrottola, L., Caumon, G., Dapogny, C., Frey, P., Froehly, A., Ghigliotti, G., Laraufie, R., Lartigue, G., Legentil, C., Mercier, R., Moureau, V., Nardoni, C., Pertant, S., Zakari, M., 2021. Tetrahedral Remeshing in the Context of Large-Scale Numerical Simulation and High Performance Computing.
- Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M.F., Benson, S., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., Constantinescu, E., Dalcin, L., Dener, A., Eijkhout, V., Gropp, W.D., Hapla, V., Isaac, T., Jolivet, P., Karpeev, D., Kaushik, D., Knepley, M.G., Kong, F., Kruger, S., May, D.A., McInnes, L.C., Mills, R.T., Mitchell, L., Munson, T., Roman, J.E., Rupp, K., Sanan, P., Sarich, J., Smith, B.F., Zampini, S., Zhang, H., Zhang, H., Zhang, J., 2022a. PETSc Web page. <https://petsc.org/>.
- Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M.F., Benson, S., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., Constantinescu, E., Dalcin, L., Dener, A., Eijkhout, V., Gropp, W.D., Hapla, V., Isaac, T., Jolivet, P., Karpeev, D., Kaushik, D., Knepley, M.G., Kong, F., Kruger, S., May, D.A., McInnes, L.C., Mills, R.T., Mitchell, L., Munson, T., Roman, J.E., Rupp, K., Sanan, P., Sarich, J., Smith, B.F., Zampini, S., Zhang, H., Zhang, H., Zhang, J., 2022b. PETSc/TAO Users Manual. Technical Report ANL-21/39 - Revision 3.17. Argonne National Laboratory.

- Balay, S., Gropp, W.D., McInnes, L.C., Smith, B.F., 1997. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries, in: Arge, E., Bruaset, A.M., Langtangen, H.P. (Eds.), *Modern Software Tools in Scientific Computing*, Birkhäuser Press. pp. 163–202.
- Bao, W., Cai, Y., 2013. Optimal error estimates of finite difference methods for the Gross-Pitaevskii equation with angular momentum rotation. *Mathematics of Computation* 82, 99–128.
- Bao, W., Du, Q., 2004. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow. *SIAM Journal on Scientific Computing* 25, 1674–1697.
- Bao, W., Wang, H., 2006. An efficient and spectrally accurate numerical method for computing dynamics of rotating Bose-Einstein condensates. *Journal of Computational Physics* 217, 612–626.
- Barenghi, C.F., Donnelly, R.J., Vinen, W.F., 1983. Friction on quantized vortices in helium II. A review. *Journal of Low Temperature Physics* 52, 189–247.
- Barenghi, C.F., Parker, N.G., 2016. *A primer on quantum fluids*. Springer.
- Bekarevich, I., Khalatnikov, I.M., 1961. Phenomenological derivation of the equations of vortex motion in he II. *Sov. Phys. JETP* 13, 643.
- Berloff, N.G., 2004. Padé approximations of solitary wave solutions of the Gross-Pitaevskii equation. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 37, 1617–1632.
- Berloff, N.G., Brachet, M., Proukakis, N.P., 2014. Modeling quantum fluid dynamics at nonzero temperatures. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 111, 4675–4682.
- Besse, C., 2004. A relaxation scheme for the nonlinear schrödinger equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 42, 934–952.
- Bewley, G.P., Lathrop, D.P., Sreenivasan, K.R., 2006. Visualization of quantized vortices. *Nature* 441, 588–588.
- Bewley, G.P., Paoletti, M.S., Sreenivasan, K.R., Lathrop, D.P., 2008. Characterization of reconnecting vortices in superfluid helium. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 105, 13707–13710.
- Billam, T.P., Reeves, M.T., Anderson, B.P., Bradley, A.S., 2014. Onsager-Kraichnan condensation in decaying two-dimensional quantum turbulence. *Phys. Rev. Lett.* 112, 145301.
- Bisset, R.N., Wang, W., Ticknor, C., Carretero-González, R., Frantzeskakis, D.J., Collins, L.A., Kevrekidis, P.G., 2015a. Bifurcation and stability of single and multiple vortex rings in three-dimensional Bose-Einstein condensates. *Physical Review A* 92, 043601.
- Bisset, R.N., Wang, W., Ticknor, C., Carretero-González, R., Frantzeskakis, D.J., Collins, L.A., Kevrekidis, P.G., 2015b. Robust vortex lines, vortex rings, and Hopfions in three-dimensional Bose-Einstein condensates. *Physical Review A* 92, 063611.
- Bose, 1924. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik* 26, 178–181.
- Boullé, N., Charalampidis, E.G., Farrell, P.E., Kevrekidis, P.G., 2020. Deflation-based identification of nonlinear excitations of the three-dimensional Gross-Pitaevskii equation. *Physical Review A* 102, 053307.

- Boullé, N., Newell, I., Farrell, P.E., Kevrekidis, P.G., 2022. Two-component 3D atomic Bose-Einstein condensates support complex stable patterns. ArXiv:2208.05703 [nlin, physics:physics].
- Bretin, V., Stock, S., Seurin, Y., Dalibard, J., 2004. Fast rotation of a Bose-Einstein condensate. *Physical review letters* 92, 050403.
- Busch, T., Anglin, J.R., 2000. Motion of dark solitons in trapped Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.* 84, 2298–2301.
- Caliari, M., Zuccher, S., 2017. INFFTM: Fast evaluation of 3d Fourier series in MATLAB with an application to quantum vortex reconnections. *Computer Physics Communications* 213, 197–207.
- Caplan, R., 2013. NLSEmagic: Nonlinear Schrödinger equation multi-dimensional Matlab-based GPU-accelerated integrators using compact high-order schemes. *Computer Physics Communications* 184, 1250–1271.
- Caplan, R., Carretero-González, R., 2013. A two-step high-order compact scheme for the Laplacian operator and its implementation in an explicit method for integrating the nonlinear schrödinger equation. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 251, 33–46.
- Castin, Y., 2001. Bose-Einstein condensates in atomic gases: simple theoretical results, in: *Coherent atomic matter waves*. Springer, pp. 1–136.
- Chang, M.S., Hamley, C.D., Barrett, M.D., Sauer, J.A., Fortier, K.M., Zhang, W., You, L., Chapman, M.S., 2004. Observation of spinor dynamics in optically trapped ^{87}Rb Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.* 92, 140403.
- Charalampidis, E., Kevrekidis, P., Farrell, P., 2018. Computing stationary solutions of the two-dimensional Gross–Pitaevskii equation with deflated continuation. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 54, 482–499.
- Charalampidis, E.G., Boullé, N., Farrell, P.E., Kevrekidis, P.G., 2020. Bifurcation analysis of stationary solutions of two-dimensional coupled Gross-Pitaevskii equations using deflated continuation. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 87, 105255.
- Chernyavsky, A., Kevrekidis, P.G., Pelinovsky, D.E., 2018. Krein signature in Hamiltonian and PT-symmetric systems, in: *Parity-time Symmetry and Its Applications*. Springer Singapore, Singapore, pp. 465–491.
- Coddington, I., Haljan, P.C., Engels, P., Schweikhard, V., Tung, S., Cornell, E.A., 2004. Experimental studies of equilibrium vortex properties in a Bose-condensed gas. *Phys. Rev. A* 70, 063607.
- Coste, C., 1998. Nonlinear Schrödinger equation and superfluid hydrodynamics. *The European Physical Journal B* 1, 245–253.
- Crasovan, L.C., Pérez-García, V.M., Danaila, I., Mihalache, D., Torner, L., 2004. Three-dimensional parallel vortex rings in bose-einstein condensates. *Phys. Rev. A* 70, 033605.
- Danaila, I., 2005. Three-dimensional vortex structure of a fast rotating Bose-Einstein condensate with harmonic-plus-quartic confinement. *Phys. Review A* 72, 013605(1–6).
- Danaila, I., Kazemi, P., 2010. A new Sobolev gradient method for direct minimization of the Gross–Pitaevskii energy with rotation. *SIAM Journal on Scientific Computing* 32, 2447–2467.

- Danaila, I., Khamsehchi, M.A., Gokhroo, V., Engels, P., Kevrekidis, P.G., 2016. Vector dark-antidark solitary waves in multicomponent Bose-Einstein condensates. *Physical Review A* 94, 053617.
- Danaila, I., Protas, B., 2017. Computation of ground states of the Gross-Pitaevskii functional via Riemannian optimization. *SIAM Journal on Scientific Computing* 39, B1102–B1129.
- Dapogny, C., Dobrzynski, C., Frey, P., 2014. Three-dimensional adaptive domain remeshing, implicit domain meshing, and applications to free and moving boundary problems. *Journal of Computational Physics* 262, 358–378.
- Davis, K.B., Mewes, M.O., Andrews, M.R., van Druten, N.J., Durfee, D.S., Kurn, D.M., Ketterle, W., 1995. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969–3973.
- Donnelly, R.J., Barenghi, C.F., 1998. The observed properties of liquid helium at the saturated vapor pressure. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 27, 1217–1274.
- Einstein, A., 1924. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. *Sitzungsberichte der preussischen Akademie der Wissenschaften* .
- Farrell, P.E., Birkisson, A., Funke, S.W., 2015. Deflation techniques for finding distinct solutions of nonlinear partial differential equations. *SIAM Journal on Scientific Computing* 37, A2026–A2045.
- Feynman, R., 1971. Application of quantum mechanics to liquid helium, in: *Helium 4*. Elsevier, pp. 268–313.
- Feynman, R.P., 1957. Superfluidity and superconductivity. *Rev. Mod. Phys.* 29, 205–212.
- Fonda, E., Meichle, D.P., Ouellette, N.T., Hormoz, S., Lathrop, D.P., 2014. Direct observation of Kelvin waves excited by quantized vortex reconnection. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 111, 4707–4710.
- Frantzeskakis, D.J., 2010. Dark solitons in atomic Bose-Einstein condensates: from theory to experiments. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 43, 213001.
- Galantucci, L., Baggaley, A.W., Barenghi, C.F., Krstulovic, G., 2020. A new self-consistent approach of quantum turbulence in superfluid helium. *The European Physical Journal Plus* 135, 547.
- Galantucci, L., Krstulovic, G., Barenghi, C.F., 2021. Friction-enhanced lifetime of bundled quantum vortices. *arXiv preprint arXiv:2107.07768* .
- Griffin, A., Shukla, V., Brachet, M.E., Nazarenko, S., 2020. Magnus-force model for active particles trapped on superfluid vortices. *Phys. Rev. A* 101, 053601.
- Gross, E.P., 1961. Structure of a quantized vortex in boson systems. *Il Nuovo Cimento (1955-1965)* 20, 454–477.
- Hall, H.E., Vinen, W.F., Shoenberg, D., 1956a. The rotation of liquid helium II I. Experiments on the propagation of second sound in uniformly rotating helium II. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 238, 204–214.
- Hall, H.E., Vinen, W.F., Shoenberg, D., 1956b. The rotation of liquid helium II II. The theory of mutual friction in uniformly rotating helium II. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 238, 215–234.

- Hecht, F., 2012. New development in Freefem++. *J. Numer. Math.* 20, 251–265.
- Hernández, V., Román, J.E., Vidal, V., 2003. Slepc: Scalable library for eigenvalue problem computations, in: Palma, J.M.L.M., Sousa, A.A., Dongarra, J., Hernández, V. (Eds.), *High Performance Computing for Computational Science — VECPAR 2002*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg. pp. 377–391.
- Houssein, H., Garnotel, S., Hecht, F., 2019. Frictionless contact problem for hyperelastic materials with interior point optimizer.
- Hänninen, R., Baggaley, A.W., 2014. Vortex filament method as a tool for computational visualization of quantum turbulence. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 111, 4667–4674.
- Inui, S., Tsubota, M., 2021. Coupled dynamics of quantized vortices and normal fluid in superfluid ^4He based on the lattice boltzmann method. *Phys. Rev. B* 104, 214503.
- Kapitza, P., 1938. Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point. *Nature* 141, 74–74.
- Kevrekidis, P.G., Pelinovsky, D.E., 2010. Distribution of eigenfrequencies for oscillations of the ground state in the Thomas-Fermi limit. *Phys. Rev. A* 81, 023627.
- Kivotides, D., Barenghi, C.F., Samuels, D.C., 2000. Triple vortex ring structure in superfluid helium II. *Science* 290, 777–779.
- Kobayashi, M., Parnaudeau, P., Luddens, F., Lothodé, C., Danaila, L., Brachet, M., Danaila, I., 2021. Quantum turbulence simulations using the Gross-Pitaevskii equation: High-performance computing and new numerical benchmarks. *Computer Physics Communications* 258, 107579.
- Kobayashi, M., Tsubota, M., 2005. Kolmogorov spectrum of superfluid turbulence: Numerical analysis of the Gross-Pitaevskii equation with a small-scale dissipation. *Phys. Rev. Lett.* 94, 065302.
- Lance, G., 2021. Shape turnpike, numerical control and optimal design for PDEs. *Theses. Sorbonne Université.*
- Landau, L., 1941. Theory of the superfluidity of helium II. *Phys. Rev.* 60, 356–358.
- Law, C.K., Leung, P.T., Chu, M.C., 2002. Quantum fluctuations of coupled dark solitons in a trapped Bose–Einstein condensate. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* , 9.
- Lehoucq, R.B., Sorensen, D.C., Yang, C., 1998. ARPACK users’ guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods. *SIAM.*
- Lieb, E.H., Seiringer, R., Solovej, J.P., Yngvason, J., 2005. *The mathematics of the Bose gas and its condensation.* volume 34. Springer Science & Business Media.
- Lieb, E.H., Seiringer, R., Yngvason, J., 2001. Bosons in a trap: A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional, in: *The Stability of Matter: From Atoms to Stars: Selecta of Elliott H. Lieb.* Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, pp. 685–697.
- Liu, D., Xiong, C., Liu, X., 2020. Vectorizing quantum turbulence vortex-core lines for real-time visualization. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* .

- Liu, Q., Logan, J., Tian, Y., Abbasi, H., Podhorszki, N., Choi, J.Y., Klasky, S., Tchoua, R., Lofstead, J., Oldfield, R., Parashar, M., Samatova, N., Schwan, K., Shoshani, A., Wolf, M., Wu, K., Yu, W., 2014. Hello ADIOS: the challenges and lessons of developing leadership class I/O frameworks. *Concurrency and Computation: Practice and Experience* 26, 1453–1473.
- London, F., 1938. The λ -Phenomenon of Liquid Helium and the Bose-Einstein Degeneracy. *Nature* 141, 643–644.
- Madison, K.W., Chevy, F., Bretin, V., Dalibard, J., 2001. Stationary states of a rotating Bose-Einstein condensate: Routes to vortex nucleation. *Phys. Rev. Lett.* 86, 4443–4446.
- Middelkamp, S., Kevrekidis, P.G., Frantzeskakis, D.J., Carretero-González, R., Schmelcher, P., 2010a. Stability and dynamics of matter-wave vortices in the presence of collisional inhomogeneities and dissipative perturbations. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 43, 155303.
- Middelkamp, S., Kevrekidis, P.G., Frantzeskakis, D.J., Carretero-González, R., Schmelcher, P., 2010b. Bifurcations, stability, and dynamics of multiple matter-wave vortex states. *Physical Review A* 82, 013646.
- Mithun, T., Carretero-González, R., Charalampidis, E.G., Hall, D.S., Kevrekidis, P.G., 2022. Existence, stability, and dynamics of monopole and Alice ring solutions in antiferromagnetic spinor condensates. *Phys. Rev. A* 105, 053303.
- Modugno, G., Modugno, M., Riboli, F., Roati, G., Inguscio, M., 2002. Two atomic species superfluid. *Phys. Rev. Lett.* 89, 190404.
- Nocedal, J., Wächter, A., Waltz, R.A., 2009. Adaptive barrier update strategies for nonlinear interior methods. *SIAM Journal on Optimization* 19, 1674–1693.
- Nore, C., Abid, M., Brachet, M.E., 1997. Decaying Kolmogorov turbulence in a model of superflow. *Physics of Fluids* 9, 2644–2669.
- Onsager, L., 1949. Statistical hydrodynamics. *Il Nuovo Cimento (1943-1954)* 6, 279–287.
- Packard, R.E., Sanders, T.M., 1972. Observations on single vortex lines in rotating superfluid helium. *Phys. Rev. A* 6, 799–807.
- Parnaudeau, P., Suzuki, A., Sac-Epée, J.M., 2015. GPS: An efficient & spectrally accurate code for computing Gross-Pitaevskii equation. ISC-2015, Research Posters Session, July 12 – 16, 2015, Germany .
- Pethick, C.J., Smith, H., 2008. Bose-Einstein condensation in dilute gases. Cambridge university press.
- Pitaevskii, L.P., 1961. Vortex lines in an imperfect Bose gas. *Sov. Phys. JETP* 13, 451–454.
- Pitaevskii, L.P., Stringari, S., 2003. Bose-Einstein condensation. Oxford University Press.
- Polizzi, E., 2009. Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems. *Phys. Rev. B* 79, 115112.
- Proment, D., Barenghi, C.F., Onorato, M., 2013. Interaction and decay of kelvin waves in the Gross-Pitaevskii model. *arXiv preprint arXiv:1308.0852* .
- Proment, D., Krstulovic, G., 2020. Matching theory to characterize sound emission during vortex reconnection in quantum fluids. *Phys. Rev. Fluids* 5, 104701.

- Ronen, S., Bortolotti, D.C.E., Bohn, J.L., 2006. Bogoliubov modes of a dipolar condensate in a cylindrical trap. *Phys. Rev. A* 74, 013623.
- Rorai, C., Sreenivasan, K.R., Fisher, M.E., 2013. Propagating and annihilating vortex dipoles in the Gross-Pitaevskii equation. *Phys. Rev. B* 88, 134522.
- Roy, A., Pal, S., Gautam, S., Angom, D., Muruganandam, P., 2020. FACT: FORTRAN toolbox for calculating fluctuations in atomic condensates. *Computer Physics Communications* 256, 107288.
- Schwarz, K.W., 1978. Turbulence in superfluid helium: Steady homogeneous counterflow. *Phys. Rev. B* 18, 245–262.
- Schwarz, K.W., 1985. Three-dimensional vortex dynamics in superfluid ^4He : Line-line and line-boundary interactions. *Phys. Rev. B* 31, 5782–5804.
- Sonin, E.B., 1997. Magnus force in superfluids and superconductors. *Phys. Rev. B* 55, 485–501.
- Stringari, S., 1996. Collective excitations of a trapped Bose-condensed gas. *Phys. Rev. Lett.* 77, 2360–2363.
- Takeuchi, H., Kobayashi, M., Kasamatsu, K., 2018. Is a doubly quantized vortex dynamically unstable in uniform superfluids? *Journal of the Physical Society of Japan* 87, 023601.
- Tang, Y., Bao, S., Guo, W., 2021. Superdiffusion of quantized vortices uncovering scaling laws in quantum turbulence. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 118, e2021957118.
- Tisza, L., 1938. Transport phenomena in Helium II. *Nature* 141, 913–913.
- Vergez, G., Danaila, I., Auliac, S., Hecht, F., 2016. A finite-element toolbox for the stationary Gross-Pitaevskii equation with rotation. *Computer Physics Communications* 209, 144–162.
- Villois, A., Krstulovic, G., Proment, D., Salman, H., 2016. A vortex filament tracking method for the Gross-Pitaevskii model of a superfluid. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 49, 415502.
- Villois, A., Proment, D., Krstulovic, G., 2020. Irreversible dynamics of vortex reconnections in quantum fluids. *Phys. Rev. Lett.* 125, 164501.
- Wächter, A., 2002. An interior point algorithm for large-scale nonlinear optimization with applications in process engineering. *Theses. Carnegie Mellon University*.
- Wächter, A., Biegler, L.T., 2005a. Line search filter methods for nonlinear programming: Local convergence. *SIAM Journal on Optimization* 16, 32–48.
- Wächter, A., Biegler, L.T., 2005b. Line search filter methods for nonlinear programming: Motivation and global convergence. *SIAM Journal on Optimization* 16, 1–31.
- Wächter, A., Biegler, L.T., 2006. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming* 106, 25–57.
- Wang, W., Bisset, R.N., Ticknor, C., Carretero-González, R., Frantzeskakis, D.J., Collins, L.A., Kevrekidis, P.G., 2017. Single and multiple vortex rings in three-dimensional Bose-Einstein condensates: Existence, stability, and dynamics. *Physical Review A* 95, 043638.
- Wächter, A., Biegler, L.T., 2006. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming* 106, 25–57.

Résumé

Depuis la description de la condensation d'un gaz de boson refroidit à 0K par Bose puis Einstein au début du XXe siècle, de nombreux travaux mathématiques, physiques et numériques ont été dédiés à l'étude des condensats de Bose-Einstein, et plus généralement de la superfluidité. Nous proposons dans cette étude des outils numériques dédiés à l'étude des excitations dans les condensats, ainsi qu'un modèle de la friction mutuelle dans l'hélium-II. Le modèle de Gross-Pitaevskii, consistant en une équation de Schrödinger non-linéaire, est utilisé pour décrire les superfluides. Des algorithmes basés sur les éléments finis, accompagnées d'une implémentation via le logiciel FreeFem++, sont proposées pour identifier les vortex dans des simulations numériques 2D et 3D ainsi que dans des images expérimentales. Diverses propriétés des vortex identifiés sont calculées : rayon des vortex, spectre de Kelvin, courbure, etc. Le problème aux valeurs propres de Bogoliubov-de Gennes, décrivant la stabilité d'un état stationnaire grâce à une linéarisation de l'équation de Gross-Pitaevskii autour de cet état, est ensuite étudié en couplant une méthode de Newton pour la recherche de l'état stationnaire et une bibliothèque de calcul de valeurs propres (ARPACK ou SLEPc) pour la résolution de l'équation de Bogoliubov-de Gennes. Deux codes FreeFem++ utilisant l'adaptation de maillage, l'un séquentiel, l'autre parallélisé avec PETSc, sont proposés. Leur fonctionnement est validé sur des cas tests issus de la littérature pour des condensats à une et deux composantes. En ce qui concerne la friction mutuelle dans l'hélium-II, un modèle phénoménologique couplant les équations de Navier-Stokes et de Gross-Pitaevskii est proposé. Ce modèle est implémenté dans un code pseudo-spectral Fortran parallélisé et testé en deux et trois dimensions sur des exemples où des résultats analytiques dans le cas d'un couplage dans une seule direction permettent la détermination des paramètres numériques. Des résultats connus sont retrouvés pour valider le travail de modélisation effectué et des simulations de structures formées de trois anneaux de vortex et de reconnection de lignes de vortex sont réalisées.

Mots-clefs : Hélium superfluide, condensats de Bose-Einstein, Gross-Pitaevskii, Navier-Stokes, Bogoliubov-de Gennes, vortex, friction mutuelle, éléments finis, FreeFem++, algorithme de Newton, toolbox open-source, simulations 2D et 3D.

Abstract

Since the description of the condensation of a boson gas cooled to 0K by Bose and Einstein in the first part of the XXth century, many mathematical, physical and numerical works have been devoted to the study of Bose-Einstein condensates and more generally superfluidity. We present in this work numerical methods for the study of excitations in condensates and a model of mutual friction in superfluid helium. The Gross-Pitaevskii model, which is a nonlinear Schrödinger equation, is used to describe superfluids. Finite-element algorithms, along with a FreeFem++ implementation, are presented for the identification of vortices in 2D and 3D numerical simulations and experimental images. Numerous properties of the vortices are computed: vortex radius, Kelvin wave spectrum, vortex line curvature, etc. The Bogoliubov-de Gennes eigenvalue problem, describing the stability of a stationary state and obtained by linearising the Gross-Pitaevskii equation around the stationary state is also studied. We couple Newton's method for the search of the stationary state with an eigenvalue computation library (ARPACK or SLEPc) for the Bogoliubov-de Gennes problem. Two FreeFem++ codes using mesh adaptation are presented: one sequential, the other parallelized with PETSc. For the study of mutual friction in superfluid helium-II, a phenomenological model coupling the Navier-Stokes and Gross-Pitaevskii equations is developed. It has been implemented in a pseudo-spectral parallel Fortran code for two and three dimensional simulations. Numerical parameters are determined by studying examples where analytical results are known in the case of a one-way coupling. Triple vortex ring structures and a vortex line reconnections have been simulated with the full coupling.

Keywords : Superfluid helium, Bose-Einstein condensates, Gross-Pitaevskii, Navier-Stokes, Bogoliubov-de Gennes, vortex, mutual friction, finite-elements, FreeFem++, mesh adaptivity, Newton algorithm, open-source toolbox, 2D and 3D simulations.