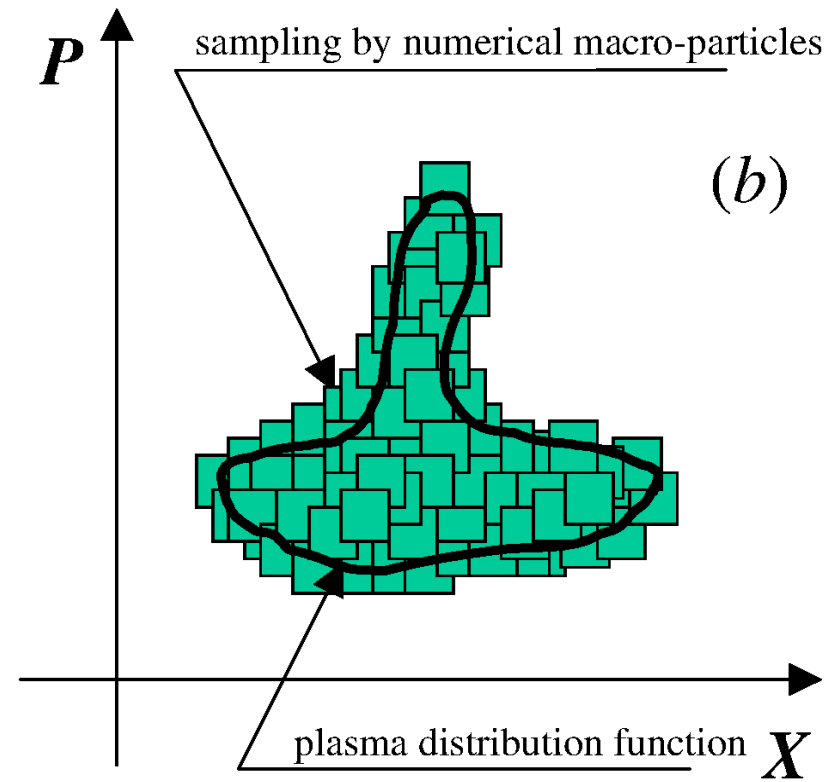
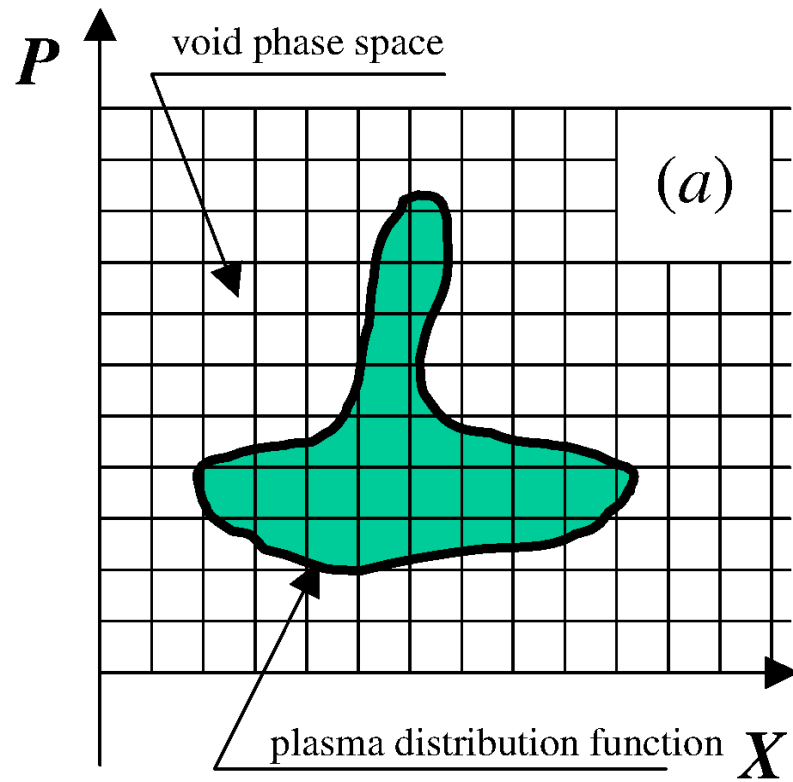
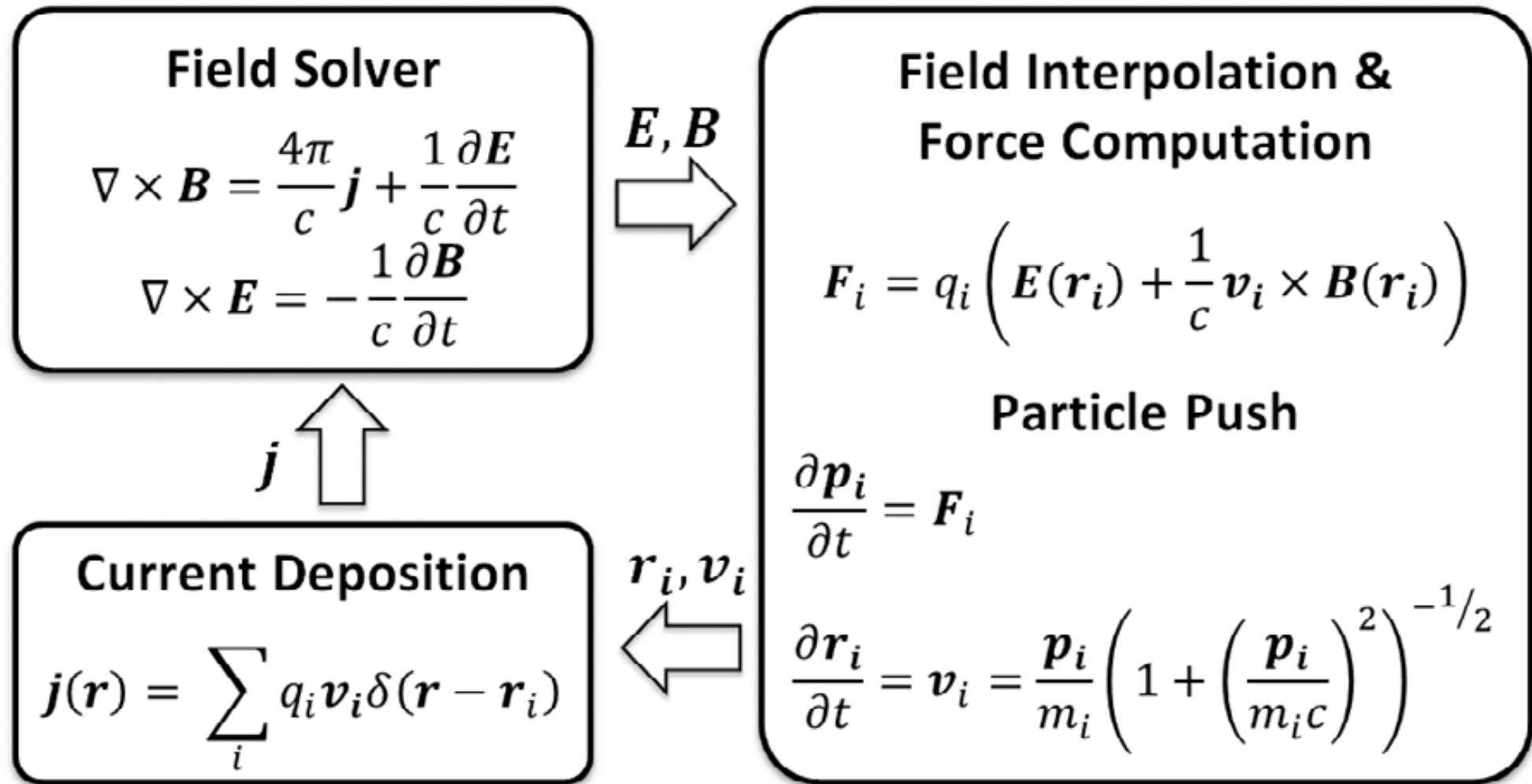


Метод частиц в ячейках (Particle-In-Cell)

Эйлеровы методы vs Лагранжевы методы



Общая схема PIC



Проблема взвешивания

$$f_N(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_{k=1}^N w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_k(t))$$

$$S^0(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} & \text{si } -\frac{\Delta x}{2} \leq x < \frac{\Delta x}{2}, \\ 0 & \text{else.} \end{cases}$$

Higher order B-splines are then defined by:

For all $m \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} S^m(x) &= (S^0)^{*m}(x), \\ &= S^0 * S^{m-1}(x), \\ &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} S^{m-1}(u) du. \end{aligned}$$

In particular the degree 1 spline is

$$S^1(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x} (1 - \frac{|x|}{\Delta x}) & \text{si } |x| < \Delta x, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

the degree 2 spline is

$$S^2(x) = \frac{1}{\Delta x} \begin{cases} \frac{1}{2} (\frac{3}{2} - \frac{|x|}{\Delta x})^2 & \text{si } \frac{1}{2} \Delta x < |x| < \frac{3}{2} \Delta x, \\ \frac{3}{4} - (\frac{x}{\Delta x})^2 & \text{si } |x| < \frac{1}{2} \Delta x, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

Проблема взвешивания

$$\rho_N = q \sum_k w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k), \quad \mathbf{J}_N = q \sum_k w_k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k$$

$$\rho_h(\mathbf{x}, t) = \int S(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rho_N(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = q \sum_k w_k S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k),$$

$$\mathbf{J}_h(\mathbf{x}, t) = \int S(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \mathbf{J}_N(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = q \sum_k w_k S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \mathbf{v}_k$$

- Метод взвешивания должен быть согласован с методом интерполяции полей – иначе возникает самовоздействие

$$\mathbf{E}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_j \mathbf{E}_j(t) S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad \mathbf{B}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_j \mathbf{B}_j(t) S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j).$$

Интегрирование движения частиц

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{x}_n}{dt} &= \frac{\mathbf{p}}{m\gamma}, \\ \frac{d\mathbf{p}_n}{dt} &= \mathbf{F} + \mathbf{F}_{\text{st}}\end{aligned}$$

- Метод Эйлера не сохраняет энергию в магнитном поле
- Метод Бориса:

$$\frac{\mathbf{p}^{n+1/2} - \mathbf{p}^{n-1/2}}{\tau} = q \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\mathbf{p}^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{p}^{n-\frac{1}{2}}}{2\gamma^n} \times \mathbf{B} \right)$$

$$\mathbf{p}^{n+1/2} = \mathbf{p}^+ + q\mathbf{E} \frac{\tau}{2}$$

$$\mathbf{p}^+ = \mathbf{p}^- + \frac{q\tau}{\gamma^n \left(1 + \left(\frac{q\tau B}{2\gamma^n} \right)^2 \right)} \mathbf{p}' \times \mathbf{B}$$

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p}^- + \frac{q\tau}{2\gamma^n} \mathbf{p}^- \times \mathbf{B}$$

$$\mathbf{p}^- = \mathbf{p}^{n-1/2} + q\mathbf{E} \frac{\tau}{2}$$

$$\gamma^n = (1 + p^{-2})^{1/2}$$

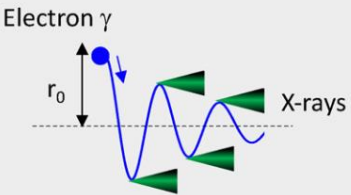
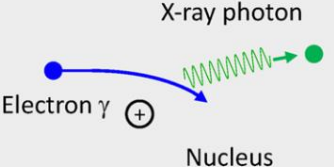
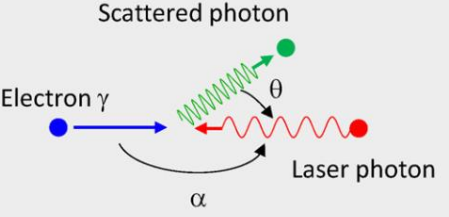
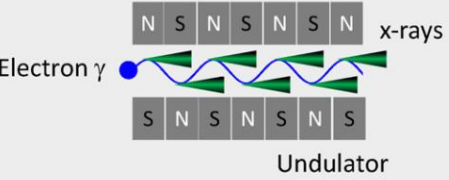
$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \frac{\mathbf{p}^{n+1/2} \tau}{\gamma^{n+1/2}}$$

$$\gamma^{n+1/2} = \left(1 + p^{n+1/2 2} \right)^{1/2}$$

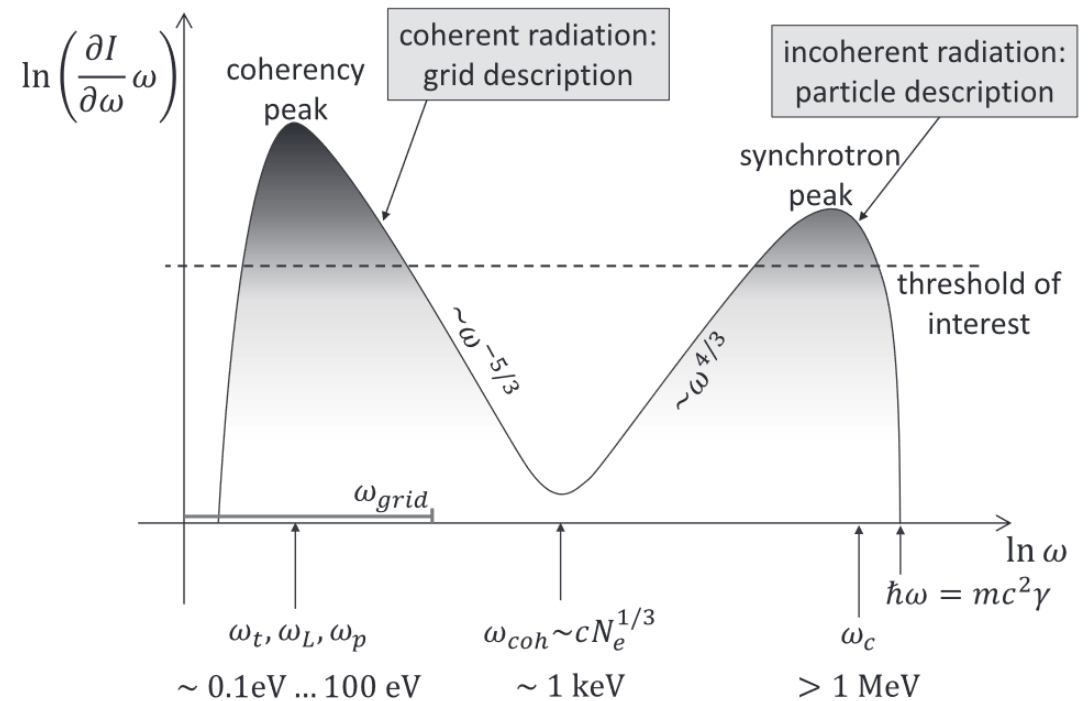
Особенности PIC

- Сохраняет заряд и массу
- Сохраняет импульс
- Не сохраняет энергию
- Требуются дополнительные усилия, чтобы выполнить уравнение Пуассона
- Устойчив при выполнении условия Куранта
- Неустойчив при неразрешении дебаевского радиуса

Моделирование излучения

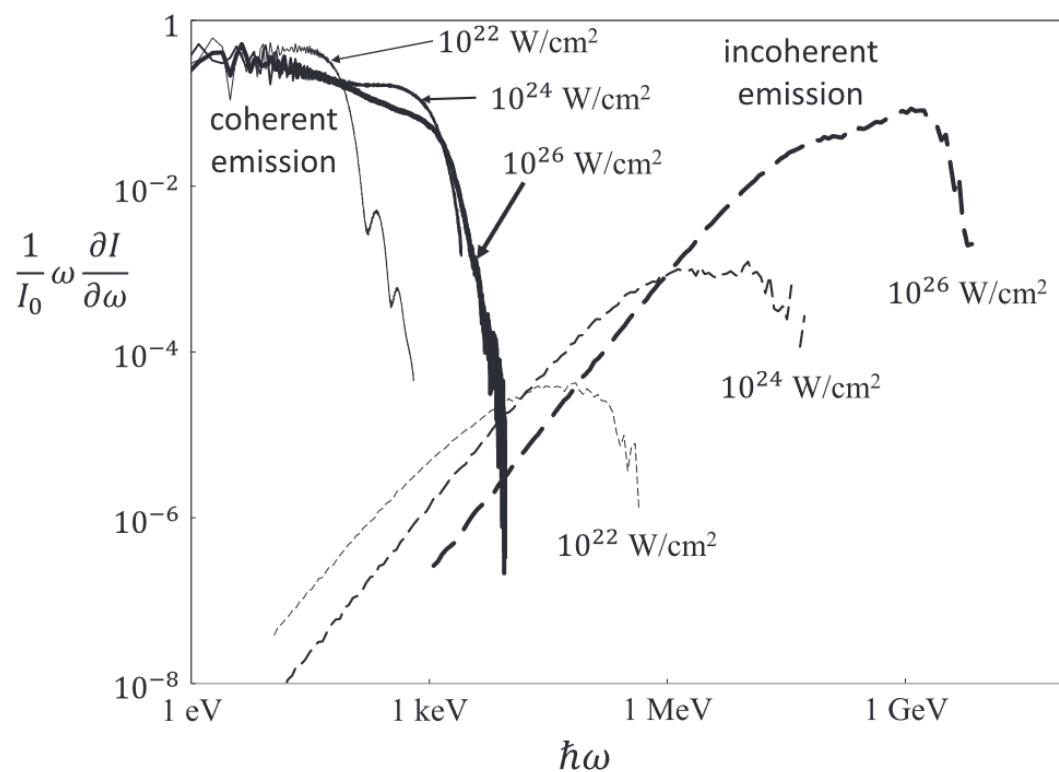
Betatron x-ray radiation	Bremsstrahlung
 <p>Electron γ r_0 X-rays</p>	 <p>X-ray photon Electron γ Nucleus</p>
Inverse Compton Scattering	Undulator/X-FEL radiation
 <p>Scattered photon Electron γ θ α Laser photon</p>	 <p>x-rays Electron γ Undulator</p>

Albert, Phys. Plasmas 30, 050902 (2023)

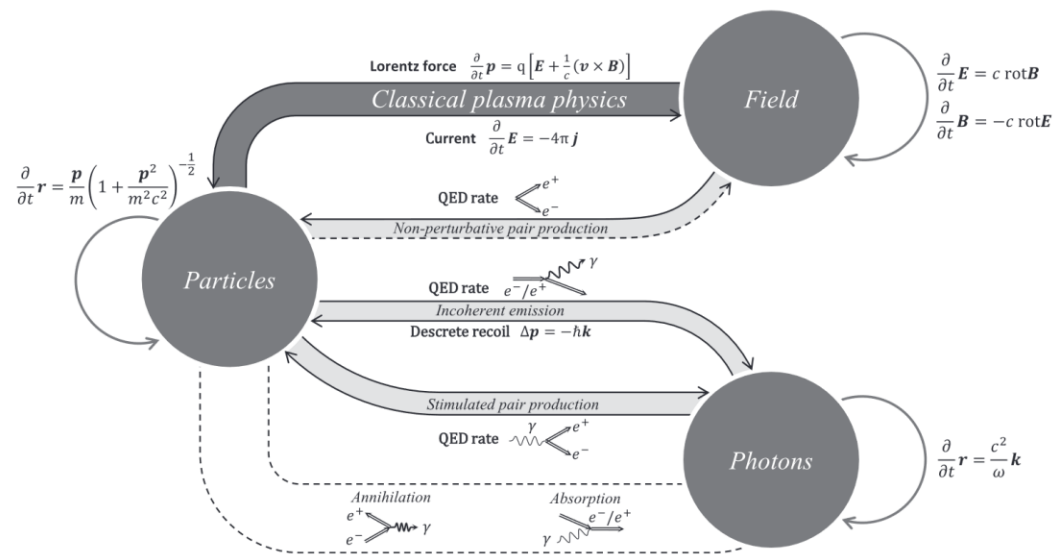


Gonoskov et al., Phys. Rev E 92, 023305 (2015)

Моделирование излучения и КЭД



Gonoskov et al., Phys. Rev E 92, 023305 (2015)



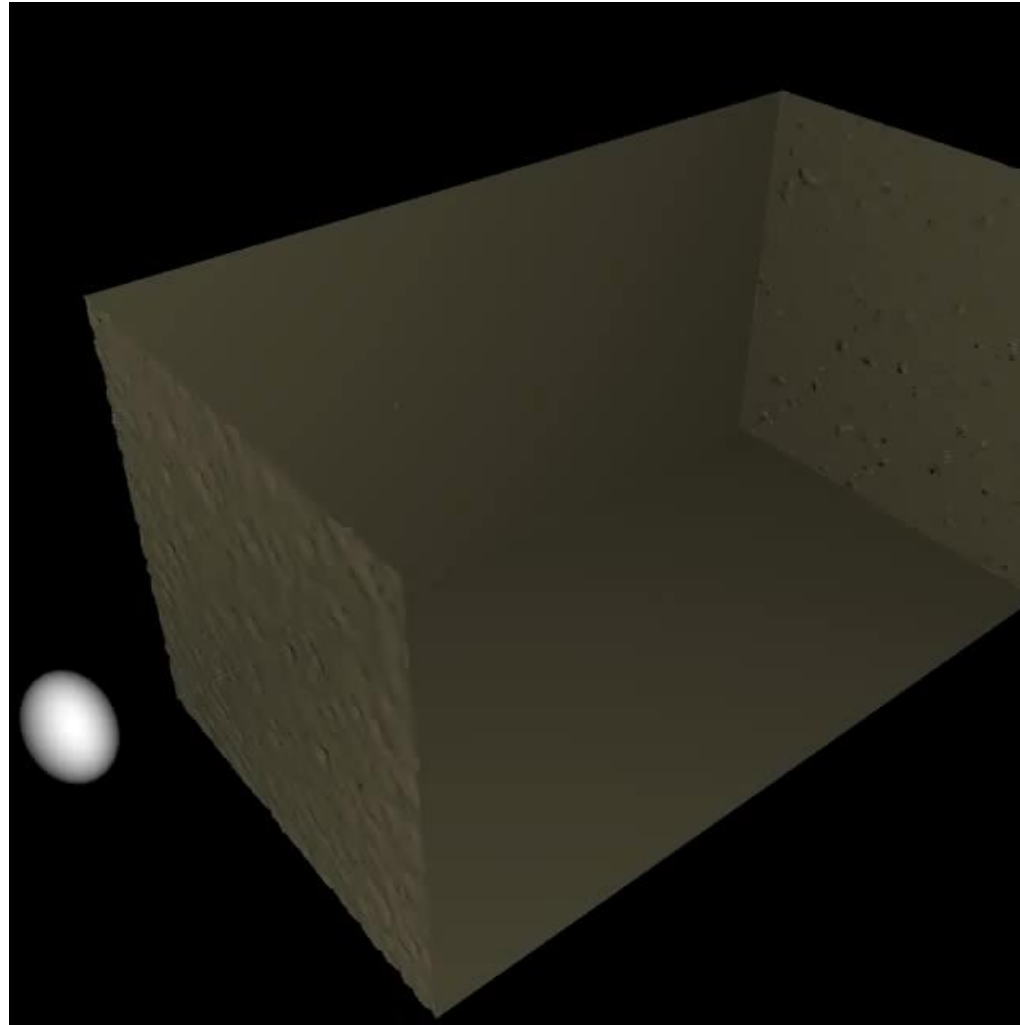
PIC программы с ОТКРЫТЫМ КОДОМ

- OSIRIS <https://osiris-code.github.io>
- EPOCH <https://epochpic.github.io>
- Smilei <https://smileipic.github.io>
- PICongGPU <https://picongpu.readthedocs.io>
- Warp <https://warp.lbl.gov>
- VPIC <https://github.com/lanl/vpic>

Smilei

- Полностью релятивистский электродинамический
- Столкновения
- Ионизация (полевая/ударная)
- Радиационное трение
- КЭД процессы (рождение гамма-квантов и пар)
- Объединение частиц
- Инжектор частиц

Пример PIC моделирования

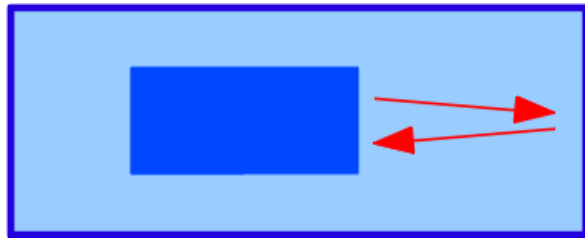


Как настроить свой PIC расчёт

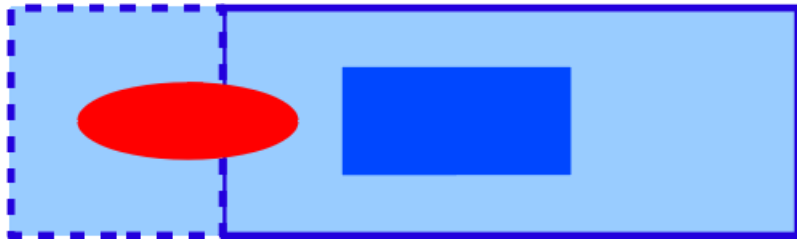
- Коробка
- Сетка
- Время
- Поле
- Частицы
- Граничные условия
- Модули

Выбор размера вычислительной области

- Количество измерений
- Исключить взаимодействие с границами



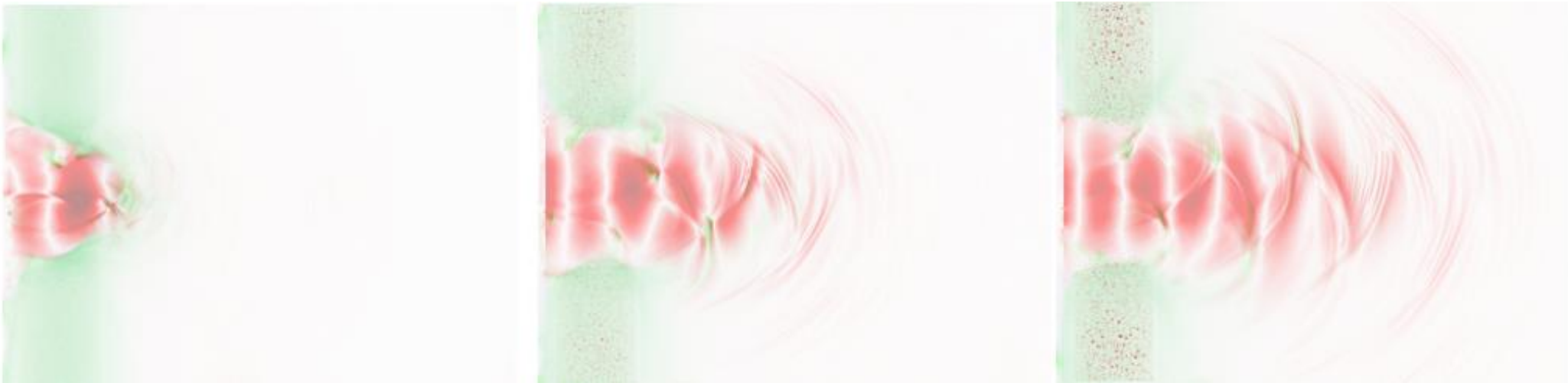
- Нужно ли дополнительное место для задания лазерного импульса?



- Можно ли использовать бегущее окно?
- Тестировать:
 - артефакты, вызванные взаимодействием с границами

Выбор размера сетки

- Может быть разным по разным измерениям
- Надо разрешать пространственные масштабы:
 - Лазерная длина волны (>8 точек на самую короткую, но только в направлении распространения)
 - Плазменный скин-слой ($>2—4$ точки, для непрозрачной плазмы)
 - Плазменная длина волны (>8 точек, если короче лазерной)
 - Гирорадиус ($>2—4$ точек)
 - Радиус Дебая (зависит от схемы интерполяции, $<1—2$ точки)
 - Другие (определяются задачей)



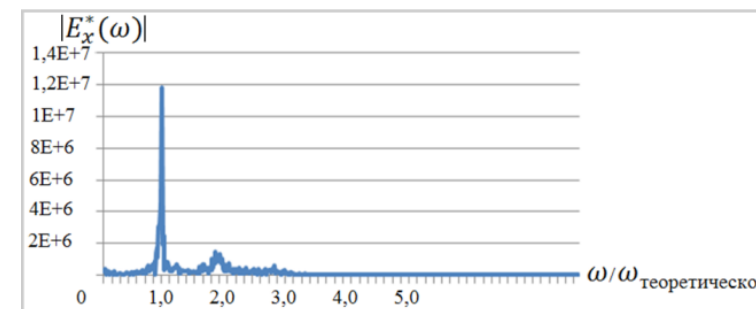
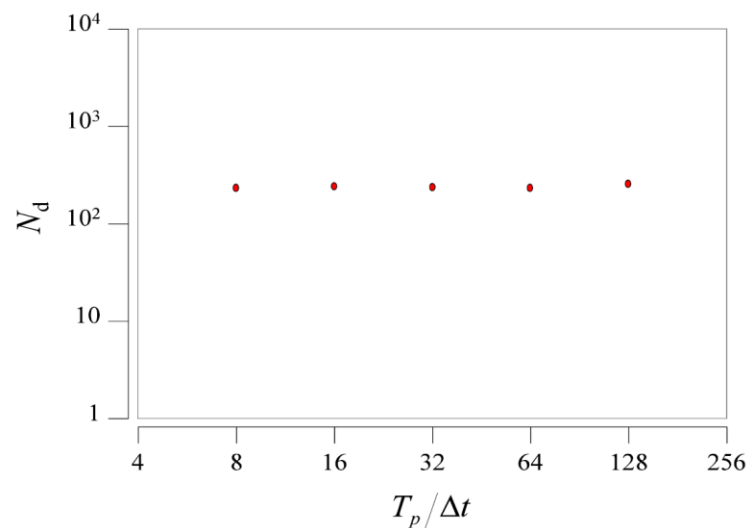
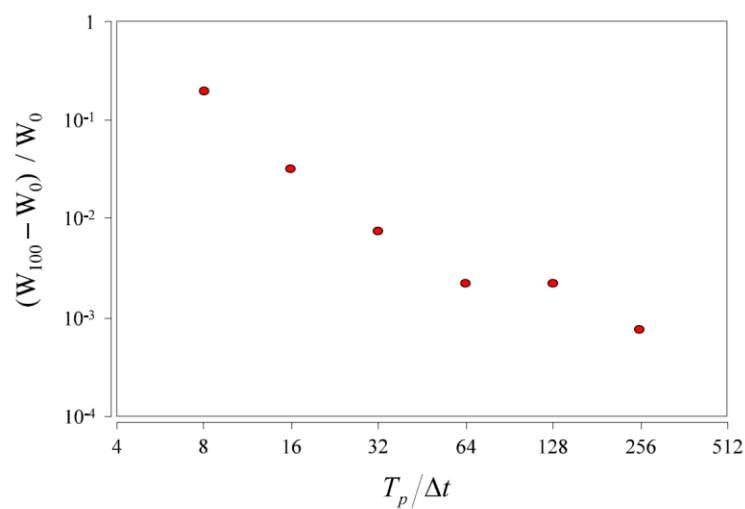
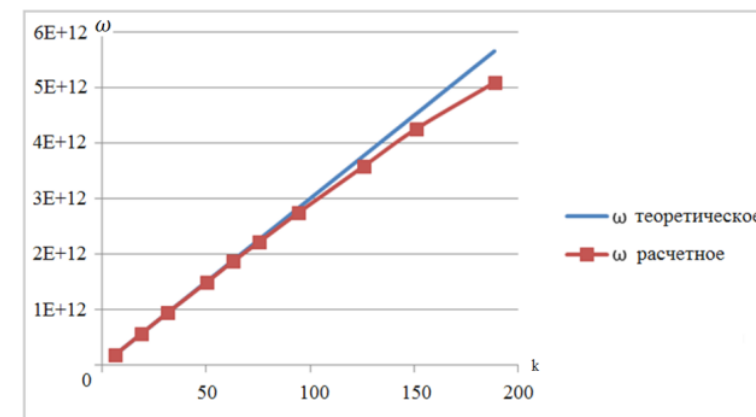
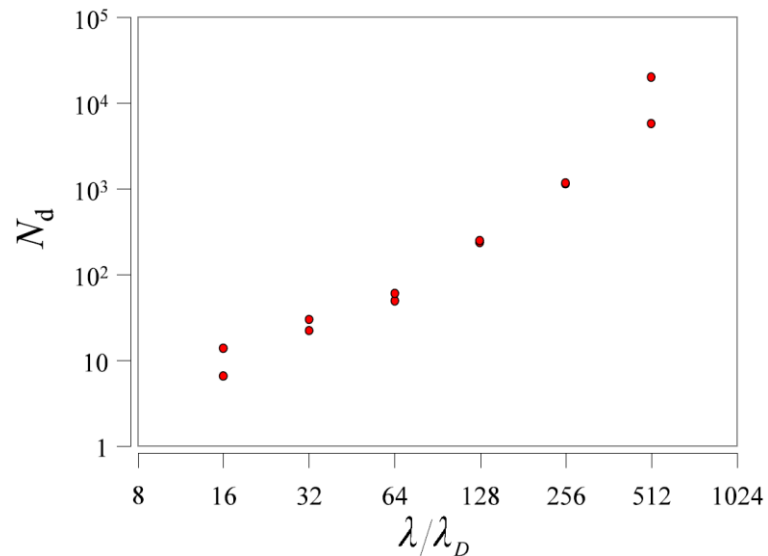
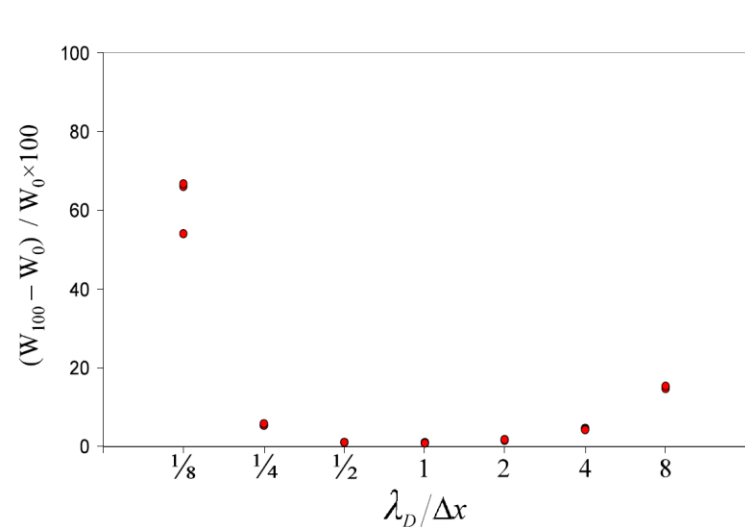
Выбор размера сетки

- Влияет на дисперсию электромагнитных волн
- При необходимости следует увеличить разрешение
- Тестировать:
 - Искусственный само-разогрев плазмы
 - Стабильность плазменных колебаний
 - Скорость распространения волн
 - Сходимость при уменьшении в 2 раза

Выбор шага по времени

- Условие устойчивости (для ЭМ решателя: $\Delta t < \Delta x / c$)
- Надо разрешать временные масштабы:
 - Лазерный период (>8 точек)
 - Плазменный период (>8 точек)
 - Циклотронный период (>8 точек)
 - Другие (зависят от задачи)
- Тестировать:
 - Искусственный само-разогрев
 - Сходимость при уменьшении в 2 раза

Тесты разрешения



Дисперсия э/м волн

$$\sin^2\left(\frac{\omega\Delta t}{2}\right) = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \sin^2\left(\frac{k_x\Delta x}{2}\right) + \left(\frac{c\Delta t}{\Delta y}\right)^2 \sin^2\left(\frac{k_y\Delta y}{2}\right) + \left(\frac{c\Delta t}{\Delta z}\right)^2 \sin^2\left(\frac{k_z\Delta z}{2}\right)$$

$$\Delta t \leq \frac{1}{c\sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}}$$

$$\sin\left(\frac{\omega\Delta x}{2\sqrt{3}c}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \sin\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)$$

$\lambda/\Delta x$	6	8	10
v_ϕ	0,968c	0,983c	0,989c
v_{gp}	0,905c	0,947c	0,967c

Инициализация полей

- Как начальные поля в коробке (стационарные внешние поля или короткие импульсы)
- Через источники на границах (для длинных импульсов)
- Можно комбинировать, но надо аккуратно сшивать
- Тестировать:
 - Распространение в отсутствии плазмы (можно на более редкой сетке)
 - Проверить распределение, интенсивность
 - Следить за артефактами

Параметры частиц

- Типы частиц (электроны, ионы, нейтралы)
- Можно ли считать ионы неподвижными?
- Задать распределение в пространстве
- Задать распределение по скоростям – как правило, максвелловское (помнить о разрешении дебаевского радиуса)
 - Но! Можно задавать нулевую температуру
- Нужны ли инжекторы?
- Тестировать:
 - Короткие расчёты с малым количеством частиц и без внешних полей
 - Проверять распределение, глобальную нейтральность, устойчивость

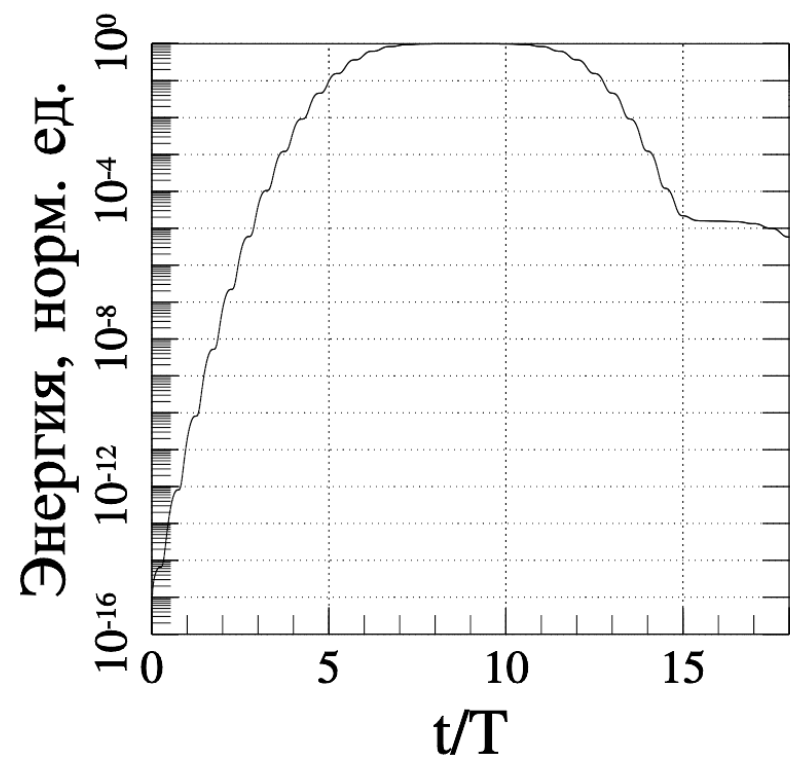
Particles per cell (PPC)

- Важно количество частиц в физически важном объёме (например, на плазменном периоде)
- Чем больше измерений, тем меньше требуется PPC
- Шум $\sim 1/\sqrt{N}$
- PPC особо влияет на неустойчивости (развиваются быстрее) и на эффекты, обусловленные хвостом функции распределения
- Тестирование:
 - Короткие расчёты: следить за устойчивостью и уровнем шума
 - Сравнить расчёты с разным PPC

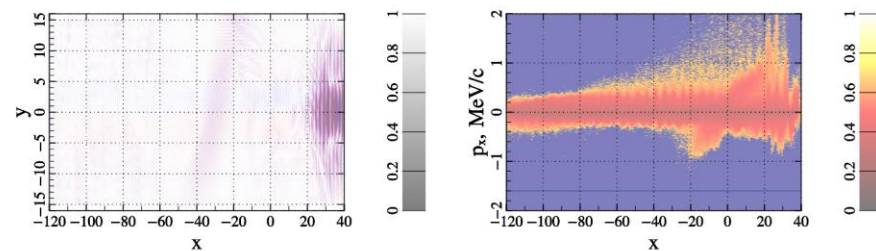
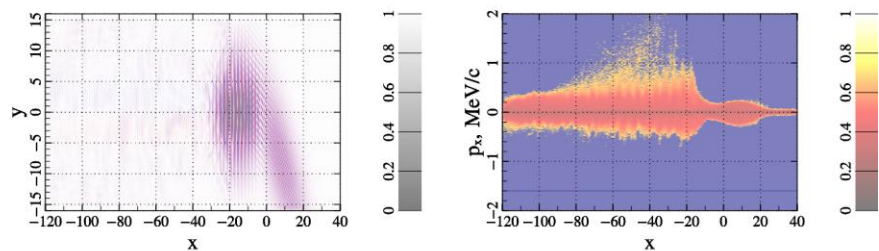
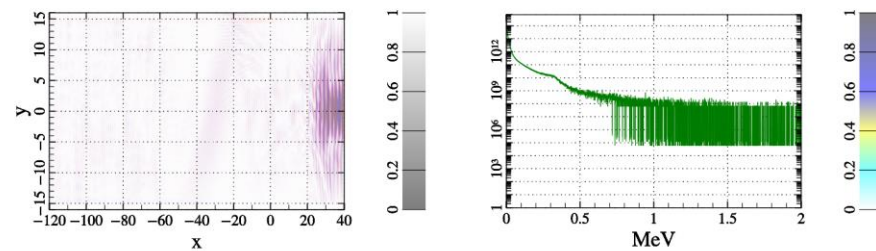
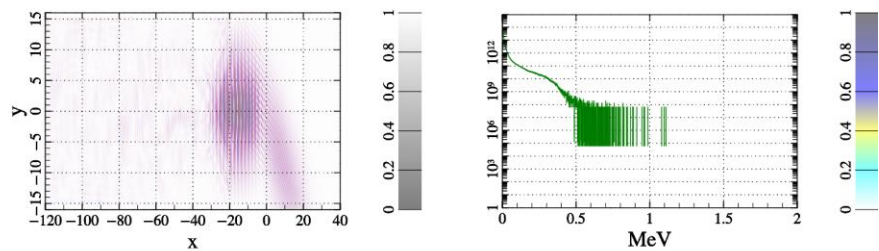
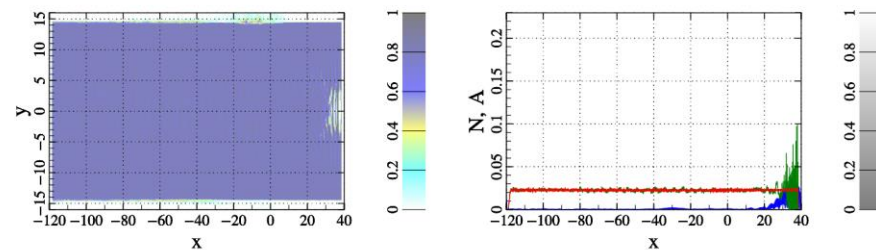
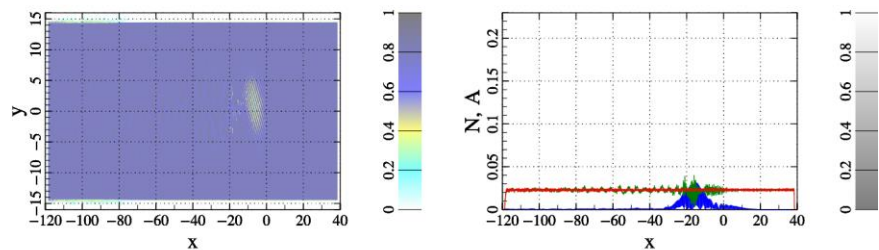
Граничные условия

- В идеале: избегать взаимодействия, особенно частиц
- Условия для полей и частиц должны быть согласованы
- Для полей:
 - Поглощающие (Perfect Matched Layer, PML) – в плазме работают плохо
 - Отражающие (почти никогда не используются)
 - Периодические (обычно в поперечном направлении)
- Для частиц:
 - Поглощающие (с или без возвращения)
 - Отражательные
 - Периодические
- Тестировать:
 - Артефакты (волны, идущие от границ)

Тест поглощающих граничных условий PML



Отражение от границ



Как увеличить точность?

- Всегда за счёт времени вычислений
- Интерполяция полей:
 - Cloud-in-cell (CIC)
 - Triangular shaped clouds (TSC)
 - Полиномы высокого порядка
- Компенсация дисперсии:
 - Искусственная анизотропия
 - NDF (Numerical Dispersion Free) решатель
- Взвешивание токов:
 - CIC
 - TSC
 - Схема Есиркепова (точное выполнение уравнения Пуассона, но очень медленно)
 - Схема Вилласенора – Бунемана (также точное выполнение уравнения Пуассона, но быстрее)
- Тестировать:
 - Запуски с разными схемами, сравнение результатов и времени вычислений

Модули

- Столкновения
- Ионизация
- КЭД
- Другие
- Тестировать:
 - Сравнивать результаты и время вычисления

Вывод данных

- Баланс между количеством информации, доступной памятью и затратами времени
- Что можно сохранять:
 - Распределения частиц в обычном и фазовом пространстве
 - Распределения полей
 - Распределения по энергиям
 - Распределения по углам
 - Траектории отдельных частиц
 - Можно включать фильтрацию частиц (например, по энергии)
 - Что-то специфичное (например, пространственное распределение недиагональных компонент тензора давления)
- Как часто сохранять?
- Желательно настроить регулярные дампы
- Тестировать:
 - Дождаться первого вывода данных и проверить их совпадение с ожиданиями

Параметры не независимы!

- Мельче шаг сетки – мельче шаг по времени
- Маленький размер коробки – более сложные граничные условия
- Шаг сетки зависит от температуры частиц и схемы интерполяции
- Меньше шаг сетки – меньше РРС
- Точность вычислений зависит от шага сетки, РРС, схем интерполяции и взвешивания

Где считать?

- На персональном компьютере: до 1—10 млн частиц
 - 1D: 1000 шагов сетки, 1000 PPC
 - 2D: 100x100 сетка, 100 PPC
- На кластерах и суперкомпьютерах

Что нужно знать для работы на суперкомпьютере

- Доступ через терминал с помощью SSH
- Как правило, установлен Linux
- Есть очередь, приоритет и квоты
 - Для тестов, как правило, есть отдельная очередь
- Сохранность данных может не гарантироваться
- Распараллеливание: на общей памяти (OpenMP, threads) и на распределённой памяти (MPI)
 - Один процесс MPI – на одном процессоре (как правило, 2 на узле)
 - Количество нитей – в два раза больше количества ядер (см. спецификации)

Литература

- Birdsall, Langdon, Plasma physics via computer simulations, Taylor and Francis (2004)
- Sonnendrucker, Numerical methods for the Vlasov equations, Lecture notes (2013)
- Pukhov, Particle-in-Cell Codes for plasma-based particle acceleration, arxiv:1510.01071 (2015)

Дома

- Показать, что явная формулировка метода Бориса эквивалентна неявной