

INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO
MEFT

Desenvolvimento da classe Particle in Cell

Projecto Final de Física Computacional
2018/2019

THOMAS GAEHTGENS 86809
DIOGO MIGUEZ 90057



1 Particle in Cell

O método *Particle in Cell* (PIC) é utilizado para resolver diversos problemas com equações diferenciais parciais. Neste projecto, aplica-se o método na resolução de um problema de física dos plasmas a **uma dimensão**: estuda-se a evolução de um *ensemble* de electrões numa caixa de limites x_{min} e x_{max} (dimensão $L = x_{max} - x_{min}$), onde se aplicam **condições fronteira periódicas** tanto para a posição como para o potencial:

$$r_i > x_{max} \implies r_i \rightarrow r_i - L \quad r_i < x_{min} \implies r_i \rightarrow r_i + L \quad \phi(x_{min}) = \phi(x_{max}) := 0 \quad (1)$$

onde r_i denomina a posição do electrão i na caixa. As quantidades do problema encontram-se adimensionadas para evitar cálculos numéricos desnecessários. Define-se uma grelha onde se encontram discretizadas a densidade de carga $n(x)$ e o potencial eléctrico $\phi(x)$. A densidade calcula-se da seguinte forma, quando a posição de uma partícula i é tal que¹:

$$x_j \leq r_i < x_{j+1} \implies n_j \rightarrow n_j + \frac{x_{j+1} - r_i}{h^2} \quad n_{j+1} \rightarrow n_{j+1} + \frac{r_i - x_j}{h^2} \quad (2)$$

O potencial, por sua vez, é dado pela equação de Poisson, que é resolvida pelo método das diferenças finitas para problemas de valores fronteira:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = \frac{n(x)}{n_0} - 1 \implies \frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{h^2} = \frac{n_i}{n_0} - 1 \quad i = 1, \dots, n_{grid} - 2 \quad (3)$$

onde n_0 é a densidade média de carga na caixa. Utilizando interpolação e derivação polinomial, define-se o campo eléctrico nas posições r_i

$$E(r_i) = -\frac{d\phi(r_i)}{dx}$$

e, finalmente, resolve-se a equação diferencial para o movimento dos electrões utilizando o método de *Runge Kutta* de 4^a ordem:

$$\frac{d^2r_i}{dt^2} = -E(r_i) \rightarrow \frac{dr_i}{dt} = v_i \quad \frac{dv_i}{dt} = -E_i \quad (4)$$

Inicialmente consideram-se dois feixes de electrões cujas posições são geradas aleatoriamente segundo uma distribuição uniforme, e cujas velocidades são geradas pela seguinte PDF:

$$F(v) = \frac{e^{-\frac{(x+5)^2}{2}} + e^{-\frac{(x-5)^2}{2}}}{2\sqrt{2\pi}} \quad (5)$$

e estuda-se a estabilidade do sistema (em função de L) através da observação da densidade e do potencial, assim como da evolução do espaço de fases.

¹devido às condições fronteira periódicas, uma variação de densidade em x_0 aplica-se também em $x_{n_{grid}-1}$, e vice-versa

2 Implementação da classe PIC

Implementou-se a classe PIC que permite simular o sistema acima descrito. A declaração da classe é apresentada na página seguinte.

MEMBROS

1. **vector<double> velocity**: vector de velocidades dos dois feixes de electrões;
2. **Npart**: número de electrões;
3. **xmin**: limite inferior da caixa;
4. **xmax**: limite superior da caixa;
5. **ngrid**: número de pontos da grelha espacial;
6. **dx**: incremento espacial, calculado a apartir de $(xmax-xmin)/(ngrid-1)$;
7. **double* x**: coordenadas dos pontos da grelha espacial;
8. **double* n**: densidade electrónica dos pontos da grelha espacial;
9. **double* phi**: potencial eléctrico nos pontos da grelha espacial;
10. **double* r**: posições dos electrões na caixa;
11. **double* v**: velocidade dos electrões na caixa;
12. **ODEpoint odep**: objecto ODEpoint que possui r_i , v_i e ef_i para uma determinada partícula no instante actual;
13. **vector<TFormula> tform**: sistema de equações que gera o sistema (4);
14. **ODEsolver odes**: objecto ODESolver que é usado em cada iteração para gerar o sistema um instante dt a seguir;
15. **double sim_time**: tempo de simulação actual (incrementa dt em cada ciclo);
16. **double* color_track**: vector que distingue os electrões de cada feixe inicial, para os pintar de cores diferentes durante toda a simulação;
17. **int* Nobj**: numero de imagens guardadas de cada função. Posições 0,1,2 correspondem às funções phase_space, density e Poisson, respectivamente; serve para enumerar correctamente as imagens guardadas;
18. **bool animate**: liga o modo *animate*, que inibe a função `gPad→WaitPrimitive()` e chama `gPad→Update()`;
19. **TApplication* MyRootApp**: aplicação de root que cria uma janela interativa onde se passa a parte gráfica;
20. **TCanvas* C**: canvas a utilizar, onde serão adicionados todos os objectos a desenhar;
21. **TLegend* legend**: cria uma legenda para mostrar tempo de simulação em todos os gráficos;
22. **TMarker* m**: usado para pintar diferentes pontos de diferentes cores (apontados por `color_track`);

MÉTODOS

1. **PIC(vector<double> velocity, int Npart=1000, double xmin=0.0, double xmax=1.0, int ngrid=100)**: constructor com respectivos valores default;
2. **~PIC()**: destructor;
3. **void FdistV(vector<double> veloc, bool save_plot, bool show_plot=false)**: função que gera as posições e velocidades iniciais, sendo as primeiras geradas uniformemente e as últimas pela PDF em (5), método de aceitação-rejeição. Possui as opções de desenhar ou guardar o plot do gráfico da PDF com o histograma obtido para as velocidades;
4. **void Plot_Phase_Space(bool save_plot, bool show_plot=false)**: função que guarda e/ou desenha o espaço de fases de todas as partículas no instante actual. Pinta os dois feixes de electrões de cores

diferentes.

5. **void Density(bool save_plot, bool show_plot=false):** calcula a densidade electrónica na grelha espacial (2). Possui as opções de mostrar/guardar o plot. **Nota:** o primeiro e o último ponto da grelha foram considerados o mesmo devido às condições fronteira periódicas; assim a densidade electrónica nesses dois pontos é sempre igual.
6. **void Poisson(bool save_plot, bool show_plot=false):** calcula o potencial na grelha através da resolução do sistema linear em (3). Possui as opções de mostrar/guardar o plot.
7. **void TimeStep(double dt):** calcula o sistema um instante dt a seguir no tempo. Utiliza um objecto *Spline3Interpolator* para interpolar e derivar o potencial nas posições das partículas (4), e chama o método RK4 para resolver o sistema de ODE's em (5).
8. **void Draw(TObject* obj1, TObject* obj2, bool colors = false, bool show_plot = false):** Se obj1 é um TGraph* e obj2 é NULL (funções plot_phase_space, density e Poisson), desenha obj1 com opções de TGraph a cores (colors = true) ou a preto e branco (colors=false). Se obj1 é uma TF1* e obj2 é um TH1F* desenha-os de acordo com os seus tipos (função FdistV). O parâmetro show_plot controla se os objectos adicionados ao Canvas são desenhados ou não. O estado do membro booleano *animate* determina se se chama a função $gPad \rightarrow WaitPrimitive()$ ou $gPad \rightarrow Update()$.
9. **void Save(string filename):** guarda o Canvas no seu estado actual num ficheiro com o nome *filename*.

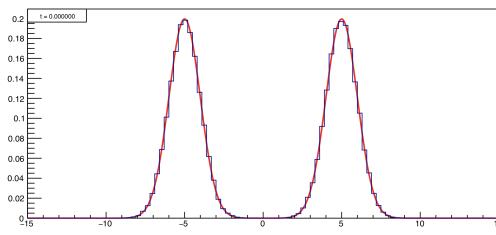
3 Resultados e Discussão

3.1 Caso I

O primeiro caso que se simulou consistiu num sistema com os seguintes dados:

$$\begin{array}{llll} N_{part} = 100000 & xmin = 0 & xmax = 50 & ngrid = 1001 \\ dx = 0.05 & dt = 0.04 & velocity = (-5, 5) & t_{sim} = 60 \end{array}$$

Os gráficos obtidos pela função FdistV, juntamente com os gráficos ilustrativos para o espaço de fase, densidade e potencial, respectivamente, em diversos instantes ao longo da simulação ($t = 0, 12, 36, 60$), encontram-se de seguida.



No instante inicial da simulação encontram-se dois feixes de eletrões paralelos no espaço de fase: a manifestação da distribuição uniforme das posições dos eletrões e da distribuição das velocidades de acordo com a PDF utilizada. Observa-se, no gráfico da densidade, que esta se encontra distribuída de forma uniforme em toda a grelha, sendo o seu valor médio o zero, o que equivale a $n(x) = n_0$. No gráfico do potencial, observa-se uma curva irregular cuja amplitude máxima está próxima de zero, o que reflete a distribuição aproximadamente igual de cargas positivas e negativas.

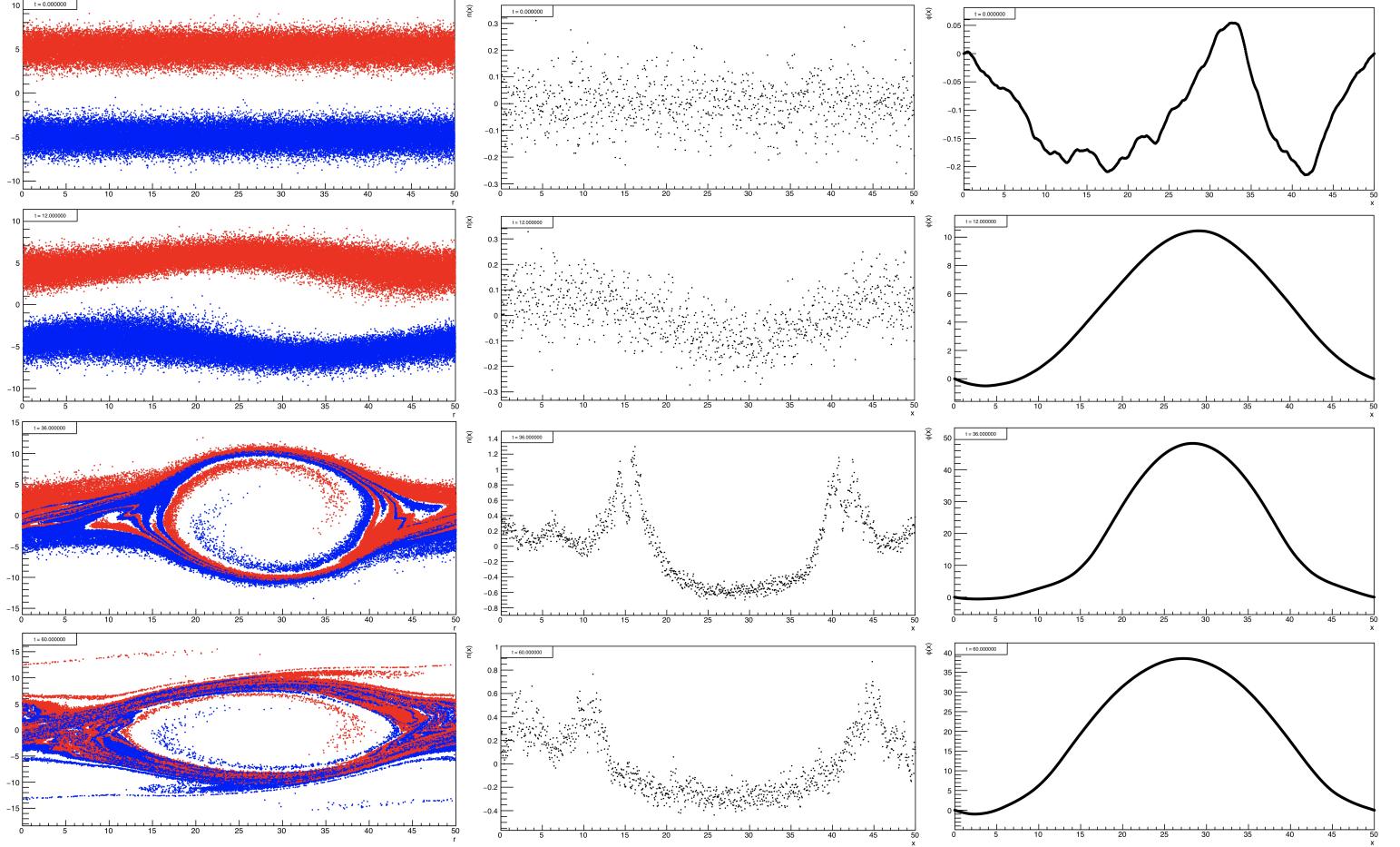


Figura 1: Evolução do sistema do caso 1.

No decorrer da evolução do sistema observa-se a formação de um vórtice no espaço de fases. O vórtice é caracterizado por uma ausência de partículas com velocidades perto de zero, havendo uma distribuição simétrica de partículas com crescente valor de velocidade, quer positiva quer negativa. Assim, como seria de esperar, a região do interior do vórtice é caracterizada por uma baixa densidade de partículas sendo observável uma depressão entre $r=20$ e $r=35$ no gráfico desta grandeza. Deste modo, encontra-se manifestada a oscilação dos electrões em torno de um centro, com um comprimento de onda de oscilação dado por duas vezes o diâmetro do vórtice² - aproximadamente $40\lambda_D$ para $t_{sim} = 36$. No entanto nota-se um alargamento do vórtice para $t_{sim} = 60$, onde o comprimento de onda será por volta de $50\lambda_D$. Espera-se uma evolução inversa entre as grandezas de densidade e potencial, uma vez que em regiões com mais electrões o potencial elétrico é mais negativo (devido à natureza da carga negativa dos electrões) e na região do vórtice (menor densidade) há uma maior concentração de cargas positivas do que negativas.

3.2 Caso II

Utilizando as mesmas condições do caso I, variou-se o valor da dimensão máxima do domínio espacial partindo de $10\lambda_D$ e incrementando em $10\lambda_D$. Inicialmente, não se observou formação de vórtices no espaço de fases. Obteve-se o primeiro vórtice para $x_{max} = 30$. Assim, partindo-se de $x_{max} = 25$ (onde não se obteve vórtice), fizeram-se incrementos de $1\lambda_D$. Conclui-se, tendo-se realizado múltiplos ensaios devido à natureza estatística das condições iniciais, que o valor de x_{max} para o qual se observa a formação do primeiro vórtice se encontra entre 29 e 30. De seguida encontram-se representados os gráficos dos espaços de fase e do potencial para $x_{max} = 29$

²aqui faz-se a distinção entre o feixe azul e vermelho: nota-se que parecem estar a oscilar sobre dois pontos ligeiramente afastados

em $t_{sim} = 60$ e $xmax = 30$ para $t_{sim} = 48$. Repare-se na ordem de grandeza do potencial nos dois casos: quando não existe vórtice, esta é notoriamente menor.

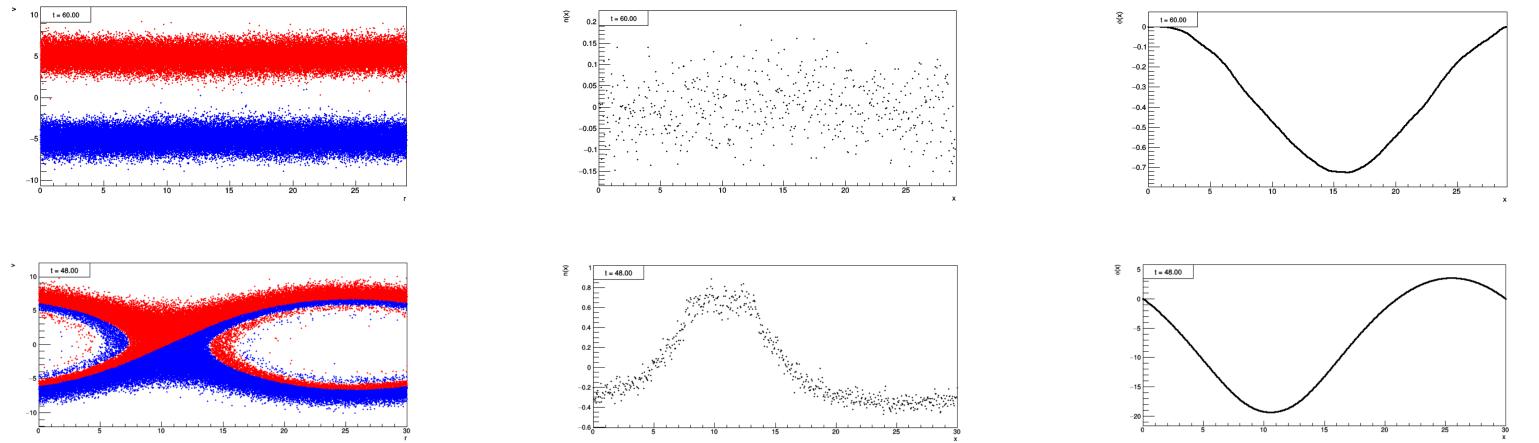


Figura 2: Figuras obtidas para a determinação de $xmax$ onde ocorre transição de regime.

Aumentando o valor de $xmax$ não se obteve nenhuma transição de regime, mas observou-se que para múltiplos de aproximadamente $40 \lambda_D$, $40k \lambda_D$, resultam k formações de vórtices, sendo que para simulações suficientemente longas, os vórtices interagem entre si, sobrepondo-se e resultando num único. Este número (40) aparenta estar relacionado com o comprimento de onda das oscilações dos electrões que se determinou no primeiro caso. O número de vórtices que se forma para cada $xmax$ foi obtido através da análise da evolução do gráfico do potencial, tendo em conta que vórtices com picos de potencial menos intensos tendem a ser rapidamente absorvidos por vórtices já estabelecidos, não sendo facilmente reconhecidos no espaço de fases. As figuras seguintes ilustram estas observações para $xmax = 160$, $xmax = 200$ e $xmax = 250$:

