Politechnika Warszawska

WYDZIAŁ FIZYKI

Praca dyplomowa inżynierska

na kierunku Fizyka Techniczna
w specjalności Fizyka komputerowa

Implementacja i analiza wydajności programu do symulacji Particle-in-Cell w języku Python

Dominik Stańczak
261604

promotor
dr Sławomir Jabłoński

WARSZAWA 2017

Streszczenie

Tytuł pracy: Implementacja i analiza wydajności programu do symulacji Particle-in-Cell w języku Python

1 Streszczenie

Język programowania Python zdobywa coraz większą popularność w fizyce obliczeniowej. Jedną z najbardziej intensywnych obliczeniowo dziedzin fizyki jest symulacyjna fizyka plazmy, czyli układów wielu cząstek obdarzonych ładunkiem elektrycznych. Przykładowym rodzajem algorytmu symulacyjnego w tej dziedzinie jest metoda particle-in-cell (“cząstka w komórce”). Niniejsza praca podejmuje próbę przetestowania możliwości Pythona wykorzystującego obliczenia macierzowe w tych zastosowaniach.

W tym celu utworzono jednowymiarowy kod symulacyjny Particle-in-Cell mający modelować interakcję relatywistycznej plazmy wodorowej oraz impulsu laserowego. Kod zoptymalizowano poprzez wykorzystanie ogólnodostępnych bibliotek wywołujących niskopoziomowe procedury numeryczne do osiągnięcia wysokiej wydajności obliczeniowej. Na jego podstawie napisano również analogiczny program w języku C++ dla porównania wydajności.

Uzyskany program zwraca dobre jakościowo wyniki, zbliżone do rezultatów z istniejących symulacji i spodziewanych wyników teoretycznych dla symulacji elektrostatycznych oraz dla symulacji interakcji tarczy wodorowej z wiązką laserową na bazie symulacji eksperymentów z Instytutu Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy.

Przeprowadzono analizę wydajności i skalowania programu w obu wersjach z liczbą cząstek. Jak pokazują benchmarki, implementacja w Pythonie mimo prób optymalizacji w wybranym paradygmacie wysokopoziomowych obliczeń macierzowych uzyskuje wyniki zadowalające, lecz gorsze niż reimplementacja w C++ przy kompilacji z optymalizacją o rząd wielkości w kwestii szybkości obliczeń.

Słowa kluczowe:

python, plazma, particle in cell, symulacja, optymalizacja, elektrodynamika

(podpis opiekuna naukowego) (podpis dyplomanta)

Abstract

Title of the thesis: Implementation and performance analysis of a Particle-in-Cell simulation code in Python

2 Abstract

The Python programming language has recently been growing in popularity in computational physics. One of the most computationally intensive branches of physics is computational plasma physics, which deals with systems of many charged particles. An example of a simulation algorithm in this area is the particle-in-cell method. This work attempts to test the capabilities of Python in these applications using a matrix calculation approach.

To this end, a one-dimensional Python particle-in-cell plasma simulation code is developed to model the interaction between a hydrogen plasma target and a laser impulse. The code is then optimized via using the high level Python programming language to call low level numerical procedures from widely available libraries. Based on this code, another program in C++ is developed to compare performance and scaling between implementations.

The developed program does well on the qualitative side, returning results comparable to existing simulations and theoretical results in the field for electrostatic and electromagnetic cases.

The performance and scaling analysis carried out in the latter part of this work shows that despite attempts at optimizing the chosen high-level matrix calculation paradigm, the developed Python code runs decently, yet more slowly than the C++ reimplementation (assuming compilation with optimization flags) by an order of magnitude in speed.

Keywords:

python, plasma, particle in cell, simulation, optimization, electrodynamics

(podpis opiekuna naukowego) (podpis dyplomanta)

Oświadczenie o samodzielności wykonania pracy

Politechnika Warszawska
Wydział Fizyki

Ja niżej podpisany/a:

Dominik Stańczak, 261604

student/ka Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej, świadomy/a odpowiedzialności prawnej przedłożoną do obrony pracę dyplomową inżynierską pt.:

Implementacja i analiza wydajności programu do symulacji Particle-in-Cell w języku Python

wykonałem/am samodzielnie pod kierunkiem

dr Sławomira Jabłońskiego

Jednocześnie oświadczam, że:

- praca nie narusza praw autorskich w rozumieniu ustawy z dnia 4 lutego 1994 o prawie autorskim i prawach pokrewnych, oraz dóbr osobistych chronionych prawem cywilnym,
- praca nie zawiera danych i informacji uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami,
- praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem dyplomu lub tytułu zawodowego w wyższej uczelni,
- promotor pracy jest jej współtwórcą w rozumieniu ustawy z dnia 4 lutego 1994 o prawie autorskim i prawach pokrewnych.

Oświadczam także, że treść pracy zapisanej na przekazanym nośniku elektronicznym jest zgodna z treścią zawartą w wydrukowanej wersji niniejszej pracy dyplomowej.

Warszawa, dnia 2017 (podpis dyplomanta)

Oświadczenie o udzieleniu Uczelni licencji do pracy

Politechnika Warszawska
Wydział Fizyki

Ja niżej podpisany/a:

Dominik Stańczak, 261604

student/ka Wydziału Fizyki Politechniki Warszawskiej, niniejszym oświadczam, że zachowując moje prawa autorskie udzielam Politechnice Warszawskiej nieograniczonej w czasie, nieodpłatnej licencji wyłącznej do korzystania z przedstawionej dokumentacji pracy dyplomowej pt.:

Implementacja i analiza wydajności programu do symulacji Particle-in-Cell w języku Python

w zakresie jej publicznego udostępniania i rozpowszechniania w wersji drukowanej i elektronicznej*.

Warszawa, dnia 2017 (podpis dyplomanta)

---

*Na podstawie Ustawy z dnia 27 lipca 2005 r. Prawo o szkolnictwie wyższym (Dz.U. 2005 nr 164 poz. 1365) Art. 239. oraz Ustawy z dnia 4 lutego 1994 r. o prawie autorskim i prawach pokrewnych (Dz.U. z 2000 r. Nr 80, poz. 904, z późn. zm.) Art. 15a. "Uczelni w rozumieniu przepisów o szkolnictwie wyższym przysługuje pierwszeństwo w opublikowaniu pracy dyplomowej studenta. Jeżeli uczelnia nie opublikowała pracy dyplomowej w ciągu 6 miesięcy od jej obrony, student, który ją przygotował, może ją opublikować, chyba że praca dyplomowa jest częścią utworu zbiorowego."

Spis treści

1 Wstęp **13**

2 Część analityczno-teoretyczna **15**
2.1 Modelowanie i symulacja plazmy . . . 16
2.2 Modele Particle-in-cell . . . 17
2.2.1 Pętla obliczeniowa PIC . . . 18
2.2.2 Makrocząstki . . . 19
2.3 Problem testowy . . . 20

3 Opis algorytmów PIC **21**
3.1 Całkowanie równań ruchu . . . 21
3.2 Komunikacja między cząstkami a siatką — depozycja i interpolacja . . . 23
3.2.1 Depozycja ładunku . . . 24
3.2.2 Interpolacja pól elektrycznego i magnetycznego . . . 25
3.3 Depozycja prądu . . . 25
3.3.1 Depozycja podłużna . . . 26
3.3.2 Depozycja poprzeczna . . . 27
3.4 Warunek początkowy pola elektrycznego: `solver` globalny, elektrostatyczny . . . 28
3.5 Ewolucja czasowa pola elektromagnetycznego . . . 28
3.5.1 Pole podłużne . . . 29
3.5.2 Pole poprzeczne . . . 30
3.6 Warunki początkowe dla cząstek . . . 31
3.6.1 Warunki brzegowe . . . 32

4 Opis i treść kodu PythonPIC **33**
4.1 Grid — siatka Eulera . . . 33
4.2 Species — cząstki . . . 34
4.3 Simulation . . . 35
4.4 Pliki pomocnicze . . . 35

5 Oprogramowanie **37**
5.1 Numpy . . . 37
5.2 scipy . . . 37
5.3 Numba . . . 37
5.4 HDF5 . . . 38
5.5 matplotlib . . . 38
5.6 py.test . . . 38
5.7 Travis CI . . . 39
5.8 snakeviz . . . 40

5.9 cProfile 40
5.10 IPython, `%timeit` 41

6 Weryfikacja **42**
6.1 Przypadki testowe 42
6.1.1 Testy algorytmiczne 42
6.2 Testy symulacyjne — przypadki elektrostatyczne 43
6.2.1 oscylacje zimnej plazmy 43
6.2.2 niestabilność dwóch strumieni 45
6.3 Testowe symulacje elektromagnetyczne — propagacja fali 45
6.4 Symulacja elektromagnetyczna — oddziaływanie wiązki laserowej z tarczą wodorową 45

7 Profilowanie **56**
7.1 Parametry uruchomienia 56
7.2 Wyniki 57

8 Wnioski **59**

Literatura **61**

Spis rysunków **64**

Spis tablic **65**

1 Wstęp

Algorytmy Particle-in-Cell (“cząstka w komórce”) są popularną metodą symulacji plazmy. Ich znaczącą zaletą jest mniejsza ilość koncepcyjnych przybliżeń względem metod takich jak symulacja magnetohydrodynamiczna, wynikająca z oparcia się o fundamentalne prawa ruchu naładowanych cząstek i dynamicznej ewolucji pola elektromagnetycznego.

Zastosowany w nich lagranżowski opis cząsteczek pozwala na dokładne odwzorowanie dynamiki plazmy poprzez dokonanie przybliżeń dotyczących krótkozasięgowego ruchu elektronów i jonów. Jednocześnie, ewolucja pola elektromagnetycznego na Eulerowskiej siatce dokonywana zamiast bezpośredniego obliczania oddziaływań międzycząsteczkowych pozwala na znaczące przyspieszenie etapu obliczenia oddziaływań międzycząsteczkowych. W większości symulacji cząsteczkowych właśnie ten etap jest najbardziej krytyczny dla wydajności progamu.[1]

W ostatnich czasach symulacje Particle-in-Cell zostały wykorzystane między innymi do

- symulacji przewidywanej turbulencji plazmy w reaktorze termojądrowym ITER [2].
- modelowania rekonekcji linii magnetycznych [3]
- projektowania silników jonowych [4]
- badania interakcji laserów z plazmą w kontekście tworzenia niewielkich, wysokowydajnych akceleratorów cząstek [5]

Należy zauważyć, że w świetle rosnącej dostępności silnie równoległej mocy obliczeniowej w postaci kart graficznych możliwości algorytmów Particle-in-Cell będą rosły współmiernie, co może pozwolić na rozszerzenie zakresu ich zastosowań. Przykładem takiego projektu jest PIConGPU [6].

Inżynieria oprogramowania zorientowanego na wykorzystanie możliwości kart graficznych, jak również w ogólności nowoczesnych symulacji wykorzystujących dobrodziejstwa nowych technologii jest jednak utrudniona poprzez niskopoziomowość istniejących języków klasycznie kojarzonych z symulacją numeryczną (C, FORTRAN) oraz istniejących technologii zrównoleglania algorytmów (MPI, CUDA, OpenCL).

Należy też zauważyć, że programy takie często są trudne, jeżeli nie niemożliwe, do weryfikacji działania, ponownego wykorzystania i modyfikacji przez osoby niezwiązane z pierwotnym autorem z powodów takich jak

- brak dostępności kodu źródłowego
- niedostateczna dokumentacja
- brak jasno postawionych testów pokazujących, kiedy program działa zgodnie z zamiarami twórców i kiedy daje wyniki zgodne z zakładanym modelem fizyki realizowanych w nim zjawisk
- zależność działania programu od wersji zastosowanych bibliotek, sprzętu i kompilatorów

To sprawia, że pisanie złożonych programów symulacyjnych, zwłaszcza przez osoby zajmujące się głównie pracą badawczą (na przykład w dziedzinie fizyki), bez dogłębnego, formalnego przeszkolenia w programowaniu i informatyce, jest znacznie utrudnione.

Jest to też znacząca przeszkoda dla adaptacji w nauce modelu `open science` i `open access` zakładanego przez Unię Europejską do przyjęcia jeszcze w bieżącym dziesięcioleciu, do roku 2020 [7].

1. WSTĘP

Niniejsza praca ma na celu utworzenie programu symulacyjnego wykorzystującego metodę Particle-in-Cell do symulacji oddziaływania wiązki laserowej z tarczą wodorową w popularnym języku wysokopoziomowym Python, przy użyciu najlepszych praktyk tworzenia reprodukowalnego, otwartego oprogramowania i zoptymalizowanie go w celu osiągania maksymalnej wydajności i sprawności obliczeniowej.

Utworzenie oprogramowania tego typu może również pozwolić na dalsze zastosowanie programu w celach badawczych i jego dalszy rozwój, potencjalnie w większej liczbie fizycznych wymiarów lub z użyciem kart graficznych, lub w innych projektach.

Python został wybrany jako język służący do implementacji bieżącej symulacji z powodu jego rosnącej popularności zarówno w programowaniu użytkowym jak i w nauce, możliwości szybkiego prototypowania (zwłaszcza w rozbudowanych środowiskach jak IPython [8] i Jupyter [9]), oraz łatwość reprodukowania warunków uruchomienia.

Atutem Pythona w wysokowydajnych obliczeniach jest łatwość użycia w nim zewnętrznych bibliotek napisanych na przykład w C lub Fortranie, co pozwala na osiągnięcie podobnych rezultatów wydajnościowych jak dla kodów napisanych w językach niskopoziomowych przy minimalnej pracy z tymi językami. Istnieje również możliwość implementacji najbardziej intensywnych obliczeniowo fragmentów programu w językach niskopoziomowych i odwoływanie się do nich z Pythona.

Python znajduje szerokie zastosowania w analizie danych i uczeniu maszynowym (zwłaszcza w astronomii[10]). W zakresie symulacji w ostatnich czasach powstały kody skalujące się nawet w zakres superkomputerów, na przykład w mechanice płynów. Nie można tu nie wspomnieć o utworzonym niedawno hydrodynamicznym kodzie PyFR, łączącym szybkie obliczenia w CUDA, OpenCL oraz OpenMP z wysokopoziomowością Pythona. Uruchomiono go na klastrze Piz Daint i udowodniono jego skalowanie (`weak scaling`) do 2000 kart NVIDIA K20X i 1.3 stabilnych petaflopów na sekundę. [11] [12]

Istotną zaletą Pythona, o której nie można nie wspomnieć, jest inherentna otwartość wśród użytkowników tego języka. Znacząca część projektów tworzonych w tym języku jest udostępnianych za darmo jako projekty `open source` w internecie na platformach takich jak GitHub, GitLab i Bitbucket, co znacząco ułatwia kolaborację i wspólne ich tworzenie przez społeczność. Jest to obszar, którego techniki wydają się być równie korzystne w społeczności naukowej.

2 Część analityczno-teoretyczna

Plazma, powszechnie nazywana czwartym stanem materii, to zbiór zjonizowanych cząstek oraz elektronów wykazujących jako grupa globalną obojętność elektryczną. Innymi słowy, od gazu plazmę odróżnia fakt, że cząstki są zjonizowane, więc oddziałują kolektywnie między sobą na odległość, ale ich pola elektryczne wzajemnie się neutralizują na długich dystansach.

Plazmy występują w całym wszechświecie, od materii międzygwiezdnej po błyskawice. Ich istnienie uwarunkowane jest obecnością wysokich energii, wystarczających do zjonizowania atomów gazu.

Fizyka plazmy jest stosunkowo młodą nauką, której rozwój nastąpił dopiero w ostatnim stuleciu, zaczynając od badań Langmuira (1928), który eksperymentował z jonizowaniem gazów w szklanych rurach zwanych rurami Crookesa, służących do generowania promieniowania katodowego, czyli, jak wiemy obecnie, strumieni elektronów.[13]

Globalny wzrost zainteresowania fizyką plazmy na arenie geopolitycznej rozpoczął się w latach czterdziestych ubiegłego wieku, gdy uświadomiono sobie, że można zastosować ją do przeprowadzania kontrolowanych reakcji syntezy jądrowej, które mogą mieć zastosowania w energetyce jako następny etap rozwoju po reakcjach rozpadu wykorzystywanych w obecnych elektrowniach jądrowych. Był to jeden z elementów zimnowojennego wyścigu technologicznego między Stanami Zjednoczonymi a ZSRR, jak również jeden z projektów mających na celu ponowne nawiązanie współpracy naukowej między supermocarstwami po zakończeniu tego konfliktu. Obecnie trwają intensywne badania nad tym problemem, których dotychczasową kulminacją jest budowany we Francji tokamak ITER i planowany reaktor DEMO.

Poza tym ogromnym projektem, plazmy mają szerokie zastosowania w obecnym przemyśle, na przykład:

- metalurgicznym — cięcie metalu przy użyciu łuków plazmowych.
- elektronicznym i materiałowym — żłobienie powierzchni urządzeń półprzewodnikowych, powierzchniowa obróbka materiałów, depozycja aktywnych jonów pod powierzchnią czyszczenie powierzchni, depozycja cienkich warstw związków chemicznych na powierzchniach (CVD).
- kosmicznym — silniki plazmowe, interakcja z rozgrzanym powietrzem podczas powtórnego wchodzenia w atmosferę.
- użytkowym — ekrany telewizorów, oświetlenie (świetlówki).

Należy też zwrócić uwagę, że ze względu na złożoność układów plazmowych pra-komputerowa fizyka miała mocno ograniczone możliwości badania dynamiki plazmy poza niewieloma reżimami łatwo wpisującymi się w bardzo uproszczone przypadki. Postęp w badaniach plazmy, jak sugeruje rozwój technologii kontrolowanej syntezy jądrowej, jest silnie skorelowany z rozwojem mocy obliczeniowej oraz algorytmów symulacyjnych.

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

2.1 Modelowanie i symulacja plazmy

Modelowanie zjawisk z zakresu fizyki plazmy jest jednym z bardziej złożonych problemów fizyki komputerowej. Koncepcyjnie rzecz biorąc, głównym powodem uniemożliwiającym zastosowanie prostych metod symulacji znanych z newtonowskiej dynamiki molekularnej jest mnogość oddziaływań — każda cząstka oddziałuje z każdą inną nawzajem poprzez niepomijalne oddziaływania kulombowskie, skalujące się z odległością jak $\approx r^{-2}$. Paradoksalnie, na dużych odległościach oddziaływania te znoszą się, co rozumie się w plazmie jako *kwaziobojętność* — jednak bez uwzględnienia oddziaływań od wszystkich cząstek nie osiągnie się tego efektu,

Z powodu dużej liczby cząstek w układach plazmowych, istnieją dwa adekwatne modele teoretyczne opierające się na fundamentalnej fizyce. Pierwszym z nich są opisy hydrodynamiczne, przybliżające plazmę jako obdarzone ładunkiem płyny wywodzące się z poszczególnych rodzajów zawartych w niej cząstek. Gdy drogi swobodne jonów i elektronów są relatywnie krótkie, przez co plazma jest dominowana przez kolizje międzycząsteczkowe, jest to znakomite przybliżenie.

Przybliżenie płynowe przestaje jednak działać poprawnie w przypadkach relatywistycznych, jak na przykład te występujące w układach, gdzie plazma generowana jest wysokoenergetycznymi impulsami laserowymi. Ten rodzaj plazmy jest uznawany za bezkolizyjny, przez co dystrybucja plazmy jest daleka od równowagowej. W tym przypadku wykorzystuje się opis kinetyczny, w którym wielkością opisującą plazmę jest funkcja dystrybucji, zwana też funkcją rozkładu, zdefiniowana jako $f_s(\vec{x},\vec{v},t)d\vec{x}d\vec{v}$ opisująca gęstość rozkładu danej grupy cząstek s plazmy w sześciowymiarowej przestrzeni fazowej (po trzy wymiary na położenia oraz prędkości) i w czasie. Ewolucja czasowa funkcji rozkładu dokonuje się poprzez rozwiązanie wariantu równania Boltzmanna zwanego równaniem Vlasova, które sprzęga gęstości ładunku i prądu otrzymywane z funkcji dystrybucji z równaniami Maxwella na ewolucję pola elektromagnetycznego.

Dla przypadku plazmy złożonej z elektronów e i jednego rodzaju jonów i o ładunku Z_i:

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + \vec{v}_e \cdot \nabla f_e - e\left(\vec{E} + \vec{v_e} \times \vec{B}\right) \cdot \frac{\partial f_e}{\partial \vec{p}} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{v}_i \cdot \nabla f_i + Z_i e\left(\vec{E} + \vec{v}_i \times \vec{B}\right) \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \vec{p}} = 0 \tag{2}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0\left(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}\right) \tag{3}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \tag{4}$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \rho/\epsilon_0 \tag{5}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \tag{6}$$

gdzie $\vec{E}$ to pole elektryczne, $\vec{B}$ - magnetyczne, $\vec{v}_e$ i $\vec{v}_i$ to prędkości odpowiednio elektronów i jonów, $\vec{j}$ to sumaryczny prąd wynikający z ruchu obu rodzajów cząstek, a ρ to gęstość ładunku.

Równanie Vlasova opisuje plazmę bezkolizyjną, w której zasięg ekranowania oddziaływań

elektromagnetycznych pochodzących od poszczególnych cząstek jest bardzo niski. Zasięg ten nazywa się długością Debye'a, która dla elektronów przyjmuje postać:

$$\lambda_D = \left(\frac{\varepsilon_0 k_B T}{n_e e^2} \right)^{1/2} \tag{7}$$

W przypadku zainteresowania zjawiskami przy relatywnie dużych długościach Debye'a (mikroskalą) równanie Vlasova może zostać rozszerzone do równania Fokkera-Plancka uwzględniającego bezpośrednie kolizje międzycząsteczkowe poprzez dodanie operatorów kolizyjnych.

W praktyce równanie Vlasova jest trudne do rozwiązania bezpośrednio jako równanie różniczkowe cząstkowe poza trywialnymi przypadkami o ułatwiających problem symetriach. Jednym z powodów tej trudności jest konieczność uzyskania dobrej rozdzielczości prędkości przy jednoczesnym zachowaniu zakresów obejmujących prędkości relatywistyczne. Należy zauważyć zaś, że skalowanie liczby punktów na siatce tego typu jest proporcjonalne do $N_r^3 N_v^3$, gdzie N_r to liczba punktów przestrzennych, zaś N_v to liczba punktów na siatce prędkości bądź pędów. Jest to więc często niepraktyczne obliczeniowo, między innymi ze względu na istotne w plazmach fuzyjnych zjawisko "uciekających elektronów" o relatywistycznych prędkościach. Ten sam problem mają modele płynowe, chociaż - dzięki założeniu termalnego rozkładu energii w plazmie - redukują złożoność siatki obliczeniowej do N_r^3 pozbywając się zależności od prędkości.

Drugim stosowanym podejściem jest dyskretyzacja oparta na wykorzystaniu dyskretnych cząstek, pozwalająca w prosty sposób uzyskać dobre przybliżenie faktycznego ruchu cząstek w plazmie i prądów generowanych tym ruchem. Pozwalają na wizualizację efektów działań pól, ale potrafią być mało wydajne do modelowania efektów kolektywnych. Istnieje jednak klasa modeli redukująca tą wadę. Są to tak zwane modele `Particle-in-cell`.

2.2 Modele Particle-in-cell

Idea modelu *particle-in-cell* (dalej nazywanego *PIC*) jest wyjątkowo prosta i opiera się na przyspieszeniu najbardziej złożonego obliczeniowo kroku symulacji dynamiki molekularnej, czyli obliczania sił międzycząsteczkowych. Cząstki poruszają się w ciągłej, Lagrange'owskiej przestrzeni. Ich ruch wykorzystywany jest do oszacowania gęstości ładunku i prądu w węzłach dyskretnej siatki Eulerowskiej. Na siatce rozwiązane są (jako równania różniczkowe cząstkowe) równania Maxwella, dzięki którym otrzymuje się pola elektryczne i magnetyczne, które z powrotem są przekazane do położeń cząstek. Obliczeniowo, uwzględniając koszty odpowiednich interpolacji, pozwala to zredukować złożoność kroku obliczenia sił międzycząsteczkowych do złożoności $O(n)$ z $O(n^2)$, gdzie n jest liczbą cząstek. Oczywiście, jest to okupione zależnością złożoności od liczby punktów na siatce m, lecz jako że $m << n$, jest to akceptowalne i korzystne.

2.2.1 Pętla obliczeniowa PIC

Obliczeniowo algorytm particle-in-cell składa się z czterech elementów powtarzających się cyklicznie:

- Zbierz (`Gather`)

  Depozycja ładunku oraz prądu z położeń cząstek do lokacji na dyskretnej siatce poprzez interpolację, co pozwala na sprawne rozwiązanie na niej równań Maxwella jako układu różnicowych równań cząstkowych zamiast obliczania skalujących się kwadratowo w liczbie cząstek oddziaływań kulombowskich między nimi. W naszym elektromagnetycznym przypadku bardziej istotną jest depozycja prądu na siatkę, co szerzej tłumaczy następny fragment.
- Rozwiąż (`Solve`)

  Sprawne rozwiązanie równań Maxwella na dyskretnej, Eulerowskiej siatce. Znalezienie pól elektrycznego i magnetycznego na podstawie gęstości ładunku i prądu na siatce. Istnieją dwie główne szkoły rozwiązywania tych równań: metody globalne i lokalne. Metody globalne wykorzystują zazwyczaj równania dywergencyjne (prawa Gaussa) 5 6 rozwiązywane iteracyjnie (metodami takimi jak Gaussa-Seidela lub gradientów sprzężonych) lub spektralnie, przy użyciu transformat Fouriera lub Hankela [14]. Metody lokalne z kolei wykorzystują równania rotacyjne (prawa Ampera-Maxwella 4 oraz Faradaya 3):
  Metody globalne nadają się do modeli elektrostatycznych, nierelatywistycznych. Metody lokalne pozwalają na ograniczenie szybkości propagacji zaburzeń do prędkości światła, co przybliża metodę numeryczną do fizyki zachodzącej w rzeczywistym układzie tego typu.
- Rozprosz (`Scatter`)

  Interpolacja pól z siatki do lokacji cząstek, co pozwala określić siły elektromagnetyczne działające na cząstki. Należy przy tym zauważyć, że jako że interpolacja sił wymaga jedynie lokalnej informacji co do pól elektromagnetycznych w okolicy cząstki, ta część sprawia, że algorytmy Particle-in-cell doskonale nadają się do zrównoleglenia (problem jest w bardzo dobrym przybliżeniu "trywialnie paralelizowalny" (ang. `trivially parallelizable`) - każda z wielu cząstek porusza się niezależnie od siebie i może być symulowana oddzielnym wątkiem). Z tego powodu oraz przez wzgląd na dużą liczbę cząstek w tych rodzajach symulacji, algorytmy Particle-in-cell nadają się doskonale do wykorzystania rosnącej mocy kart graficznych i architektur GPGPU.
- Porusz (`Push`)

  iteracja równań ruchu cząstek

$$d\vec{p}/dt = \vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \tag{8}$$

  na podstawie ich prędkości (aktualizacja położeń) oraz działających na nie sił elektromagnetycznych (aktualizacja prędkości). Należy zauważyć, że modele PIC nie modelują bezpośrednich kolizji między cząstkami. Kolizje mogą jednak zostać dodane niebezpośrednio, na przykład poprzez metody Monte Carlo.

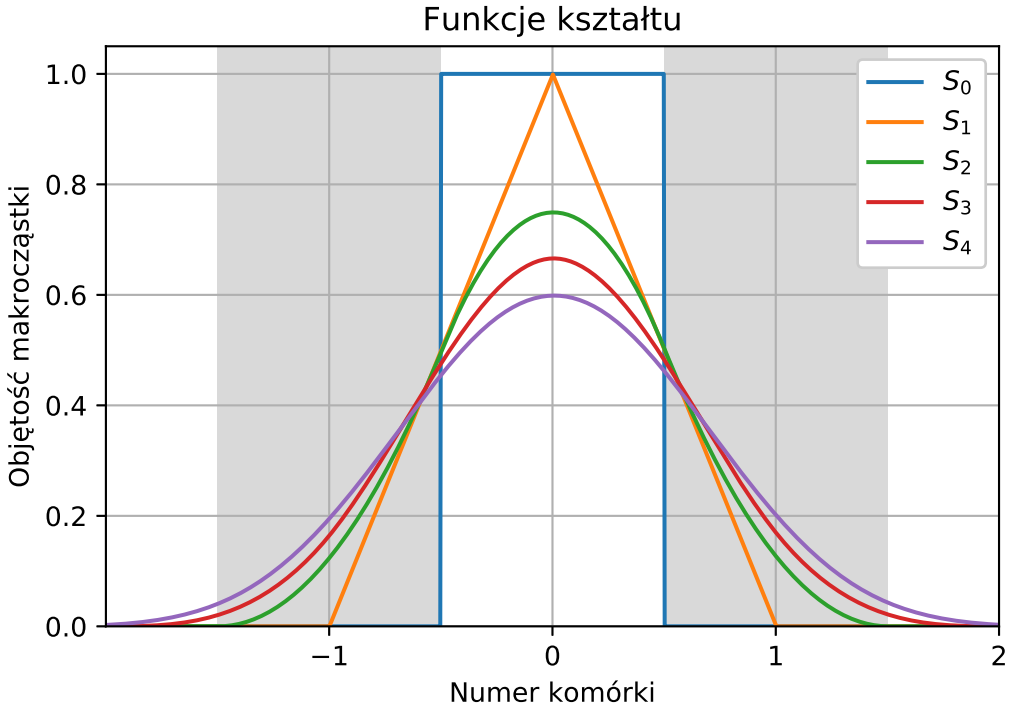
Jako że każda cząstka, zakładając znane pola elektromagnetyczne w jej położeniu, porusza się niezależnie, jest to kolejny fragment doskonale nadający się do zrównoleglenia.

2.2.2 Makrocząstki

Należy zauważyć, że obecnie nie jest jeszcze możliwe dokładne odwzorowanie dynamiki układów plazmowych w sensie interakcji między poszczególnymi cząstkami ze względu na liczbę cząstek rzędu liczby Avogadro $\approx 10^{23}$. W tym kontekście bardzo korzystnym jest fakt, że wszystkie istotne wielkości zależą nie od ładunku ani masy, ale od stosunku q/m. W praktyce stosuje się więc *makrocząstki*, obdarzone ładunkiem i masą będące wielokrotnościami tych wielkości dla cząstek występujących w naturze (jak jony i elektrony), pozwalając jednocześnie zachować koncentracje cząstek, gęstości ładunku i prądu zbliżone do rzeczywistych.

Makrocząstki posiadają też kształt, który wyraża się w symulacji poprzez interpolację wielkości fizycznych znanych na siatce Eulera do położeń cząstek i odwrotnie. Matematycznie jest to opisane poprzez funkcję kształtu. Najprostszą jednowymiarową funkcją kształtu, oznaczaną S_0, jest funkcja "cylindrowa", która oznacza jednorodny rozkład gęstości cząstki w zakresie szerokości równym długości jednej komórki.

Inne funkcje kształtu tworzy się poprzez kolejne sploty funkcji podstawowej, co obrazuje rysunek1. Funkcja S_1 (trójkątna, skupiona na środku) jest tradycyjną funkcją kształtu wykorzystywaną historycznie w większości zastosowań modelu PIC.



Rysunek 1: Typowe funkcje kształtu dla makrocząstki

W symulacjach elektromagnetycznych zazwyczaj stosuje się gęstości cząstek (rzeczywistych) rzędu jednej dziesiątej bądź setnej gęstości krytycznej plazmy n_c (wyrażaną wzorem 9), która oznacza taką koncentrację elektronów, przy której fala laserowa zaczyna być tłumiona zamiast być przepuszczaną przez plazmę.[15]

$$n_c = m_e \varepsilon_0 \left(\frac{2\pi c}{e\lambda}\right)^2 \tag{9}$$

gdzie m_e to masa spoczynkowa elektronu, ε_0 to przenikalność elektryczna próżni, c to prędkość światła w próżni, e to ładunek elementarny, zaś λ to długość fali.

Gęstość takiej makrocząstki, oznaczana n_{pic}, oznacza innymi słowy liczbę rzeczywistych cząstek, jakie reprezentuje sobą jedna makrocząstka.

2.3 Problem testowy

Głównym problemem testowym, jakiego używamy do przetestowania dokładności i wydajności działania algorytmu jest interakcja impulsu laserowego z tarczą składającą się ze zjonizowanego wodoru i elektronów.

Układ ten modelowany jest jako jednowymiarowy. Jest to tak zwany w literaturze model 1D-3D. O ile położenia cząstek są jednowymiarowe ze względu na znaczną symetrię cylindryczną układu, cząstki mają prędkości w pełnych trzech wymiarach. Jest to konieczne ze względu na oddziaływania cząstek z polem elektromagnetycznym propagującym się wzdłuż osi układu i możliwość dowolnego dobrania kierunku polaryzacji promieniowania laserowego w symulacji.

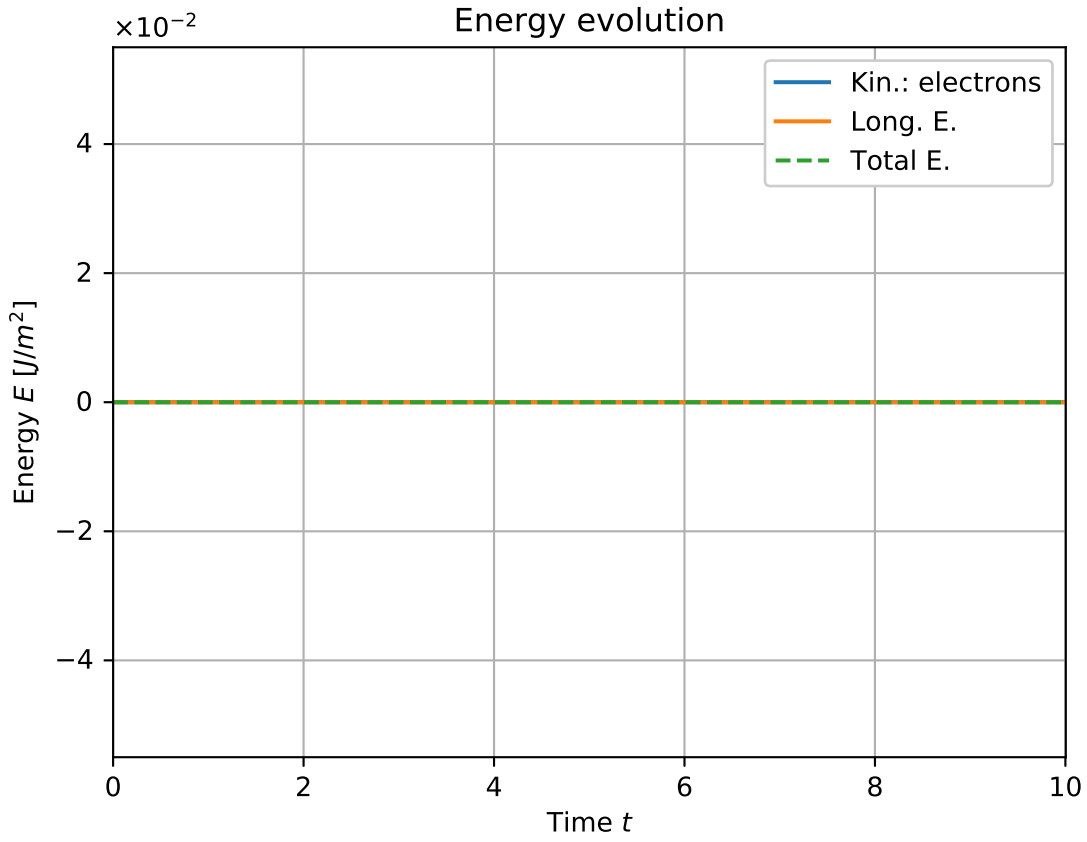
Układ ten jest silnie zbliżony do rzeczywistych eksperymentów prowadzonych uprzednio w Instytucie Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy, mających na celu badanie akceleracji wodoru zaokludowanego w metalach. Obecnie realizowane są tam prace nad tarczami, które w porównaniu do założonej w bieżącej symulacji różnią się wyższą gęstością oraz wykonaniem z innych materiałów (węgla, metali).[16],[17]

3 Opis algorytmów PIC

3.1 Całkowanie równań ruchu

Każda symulacja cząstek wymaga zastosowania integratora równań ruchu. Tradycyjnym przykładem takiego integratora jest integrator Rungego-Kutty czwartego rzędu, znajdujący zastosowanie w wielorakich symulacjach.

Niestety, w bieżącym kodzie nie można go zastosować ze względu na to, że należy do klasy integratorów niesymplektycznych: mimo ogromnej dokładności jest on niestabilny pod względem energii cząstek [18]. W symulacjach typu Particle-in-cell konieczne jest zastosowanie innych algorytmów, symplektycznych. Dobrym algorytmem symplektycznym jest na przykład powszechnie znany *leapfrog*, polegający na przesunięciu prędkości o połowę iteracji czasowej względem położeń.[18] Mimo tego, że energia układu w ruchu cząstek obliczonym tym integratorem nie jest lokalnie stała na krótkich skalach czasowych, to jednak zachowuje energię na skali globalnej, co pokazuje rysunek 2.



Rysunek 2: Energia w symulacji elektrostatycznej. Ze względu na brak pola magnetycznego w tej symulacji używany jest efektywnie iterator typu leapfrog.

W przypadku ruchu przy niezerowym polu magnetycznym zwykły algorytm *leapfrog* okazuje się być niewystarczający w celu zachowania energii cząstek[1]. Zamiast niego używa się specjalnej adaptacji tego algorytmu na potrzeby ruchu w zmiennym polu elektromagnetycznym, tak zwanego integratora Borysa (lepiej opisanego w [1]), który rozbija pole elektryczne na dwa impulsy, między którymi następują dwie rotacje polem magnetycznym. Algorytm jest dzięki temu symplektyczny i długofalowo zachowuje energię cząstek.

W naszym przypadku dochodzi jeszcze jedno utrudnienie związane z relatywistycznymi prędkościami osiąganymi przez cząstki (zwłaszcza elektrony) w symulacji. Przed obliczeniem korekty prędkości konieczne jest przetransformowanie prędkości z układu "laboratoryjnego" $\vec{v}$ na prędkość w układzie poruszającym się z cząstką $\vec{u}$, czego dokonuje się poprzez prostą transformację:

$$\vec{u} = \vec{v}\gamma \tag{10}$$

$$\gamma = \sqrt{1 - (v/c)^2} = 1/\sqrt{1 + (u/c)^2} \tag{11}$$

Aktualizację prędkości należy więc przeprowadzić na $\vec{u}$, nie na $\vec{v}$. Po zakończeniu aktualizacji należy również powrócić do $\vec{v}$ jako prędkości używanej do depozycji prądu.

Ostatecznie otrzymujemy więc następujące równanie ruchu dla cząstki o masie spoczynkowej m_0:

$$m_0 \frac{d\vec{u}}{dt} = q\left(\vec{E} + \vec{u}/\gamma \times \vec{B}\right) \tag{12}$$

[1] Można to łatwo sprawdzić poprzez umieszczenie cząstki z niezerowym ładunkiem i prędkością w polu magnetycznym. Cząstka zacznie, zamiast krążyć po okręgu, opadać do jego środka.

Oraz zestaw równań różnicowych przetwarzanych w następującej kolejności:

$$\vec{u}^{n-1/2} = \vec{v}^{n-1/2} / \sqrt{1 - \left(\vec{v}^{n-1/2}/c\right)^2} \tag{13}$$

$$\vec{u}^{-} = \vec{u}^{n-1/2} + \frac{q\Delta t}{2m_0}\vec{E}^n \tag{14}$$

$$\gamma^{-} = \sqrt{1 + \left(\vec{u}^{-}/c\right)^2} \tag{15}$$

$$\vec{t} = \frac{q\Delta t}{2m_0\gamma^{-}}\vec{B}^n \tag{16}$$

$$\vec{u'} = \vec{u}^{-} + \vec{u}^{-} \times \vec{t} \tag{17}$$

$$\vec{s} = \vec{t}/(1 + \|t\|^2) \tag{18}$$

$$\vec{u}^{+} = \vec{u}^{-} + \vec{u'} \times \vec{s} \tag{19}$$

$$\vec{u}^{n+1/2} = \vec{u}^{+} + \frac{q\Delta t}{2m_0}\vec{E}^n \tag{20}$$

$$\vec{v}^{n+1/2} = \vec{u}^{n+1/2} / \sqrt{1 + \left(\vec{u}^{n+1/2}/c\right)^2} \tag{21}$$

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \vec{v}^{n+1/2}\Delta t \tag{22}$$

3.2 Komunikacja między cząstkami a siatką — depozycja i interpolacja

Kolejnym krokiem pętli obliczeniowej po rozwiązaniu równań ruchu na aktualizację prędkości, po której — przypomnijmy — dysponujemy położeniami cząstek x^n w chwilach n oraz ich prędkościami $v^{n+1/2}$ w chwilach $n + 1/2$ jest obliczenie prądów podłużnych i poprzecznych potrzebnych do obliczenia wartości pól elektromagnetycznych w kolejnej iteracji.

W bieżącym programie gęstość ładunku jest tak naprawdę niepotrzebna w mechanice symulacji. Ewolucja pola następuje poprzez znajomość gęstości prądu. Jeżeli zaś pole elektromagnetyczne spełniało warunek prawa Gaussa 5 na początku, depozycja prądu w sposób zachowujący ładunek zapewni dalsze zachowanie tego warunku w kolejnych iteracjach. [19]

Wyjątek stanowi początek symulacji, w której pole faktycznie musi zostać obliczone od podstaw na podstawie gęstości ładunku. Program będący przedmiotem pracy pozwala poradzić sobie z tym problemem. Pierwszą opcją jest ustawienie początkowych położeń ładunków na identyczne między cząstkami negatywnymi i dodatnimi, co pozwala na siłowe wyzerowanie gęstości ładunku i brak pola elektrycznego w rejonie symulacji.

Drugą, bardziej ogólną metodą pozwalającą na niezerowy rozkład gęstości ładunku jest zebranie gęstości ładunku z początkowych położeń cząstek i rozwiązanie równań na pola metodą globalną (na przykład spektralnie). Jest to jedyny moment, gdzie zebranie gęstości ładunku jest faktycznie konieczne. Mimo to, gęstość cząstek (proporcjonalna do gęstości ładunku jako $\rho = \sum_s q_s n_s$) jest wciąż zbierana w symulacji jako wygodna diagnostyka ewolucji przestrzennej plazmy w obszarze symulacji. Ze względu na prostotę algorytmu, nie zabiera ona dużo czasu obliczeniowego (do 2% czasu trwania symulacji).

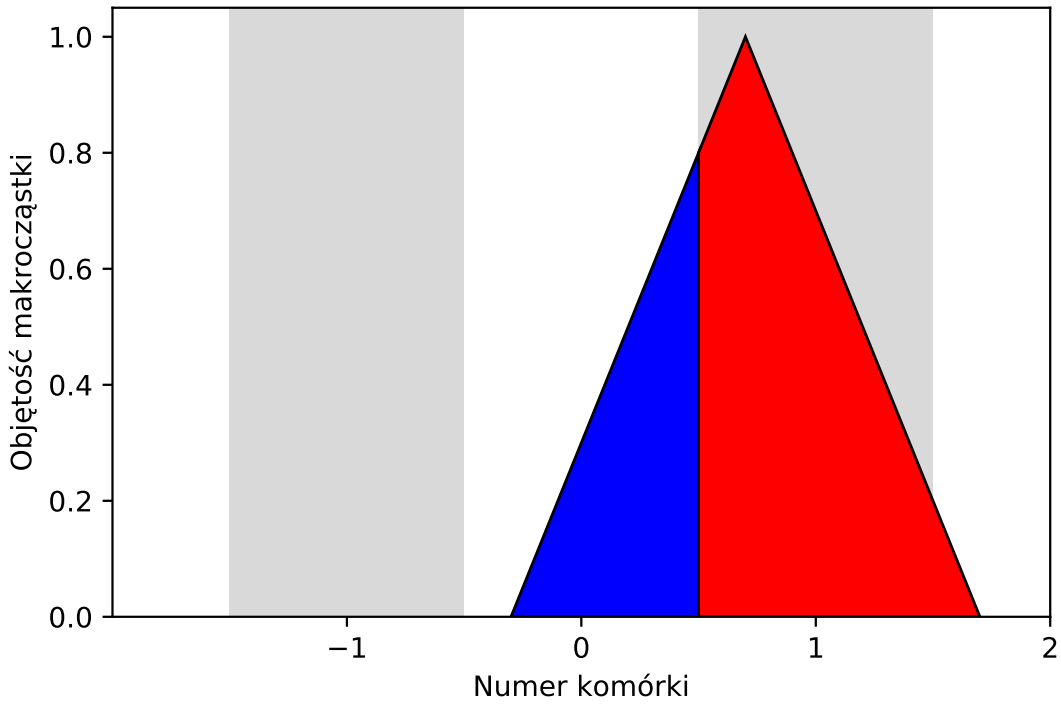
3.2.1 Depozycja ładunku

Depozycja ładunku odbywa się w prosty sposób. Dla każdego rodzaju cząstek obliczana jest ich gęstość liczbowa (koncentracja). Najpierw obliczane jest względne położenie każdej cząstki w komórce, do której przynależy, poprzez

$$x' = (x/dx) - i_x \tag{23}$$

gdzie i_x to indeks komórki, w której znajduje się cząstka.

Następnie gęstość cząstki jest rozkładana pomiędzy bieżącą komórkę a następną w stosunku $n_i = 1 - x'$, $n_{i+1} = x'$. Cząstka będąca w połowie komórki rozkładałaby więc swój ładunek po równo między obie komórki, co ilustruje rysunek 3.



Rysunek 3: Ilustracja depozycji ładunku poprzez skalowanie pola (`area weighting`). Do komórki 0 przypisana zostanie część ładunku proporcjonalna do niebieskiej części pola trójkąta, zaś do 1 - reszta.

Po obliczeniu otrzymana tablica gęstości *makrocząstek* na siatce jest mnożona przez parametr `scaling` cząstek, co pozwala na obliczenie gęstości rzeczywistych cząstek modelowanych przez makrocząstki. Tablica gęstości ładunku jest otrzymywana poprzez zsumowanie tablic gęstości wszystkich gatunków cząstek w układzie.

3.2.2 Interpolacja pól elektrycznego i magnetycznego

Interpolacja pól elektrycznego i magnetycznego odbywa się na bardzo podobnej zasadzie, co depozycja ładunku. Wartosci pól są liniowo skalowane do pozycji makrocząstek według ich względnych położeń (równanie 23) wewnątrz komórek.

$$F = F_i(1 - x') + F_{i+1}x' \tag{24}$$

3.3 Depozycja prądu

Depozycja prądu jest bardziej złożonym zagadnieniem niż depozycja ładunku. Prądy potrzebują bowiem informacji o prędkości czastek w połówkowych iteracjach $v^{n+1/2}$, ale sama interpolacja do komórek siatki wymaga położeń w iteracji całkowitej x^n. Poza tym jest też kwestia, że zwykłe liniowe przeskalowanie ładunku i parametru `scaling` przez prędkość w danym kierunku nie jest wystarczające z tego powodu, że taki sposób depozycji nie spełnia warunku zachowania ładunku. Strumień prądu podłużny powinien reprezentować zmianę gęstości ładunku w czasie. W postaci różniczkowej można to zapisać, za [19]:

$$\nabla \cdot \vec{J} = -\partial\rho/\partial t \tag{25}$$

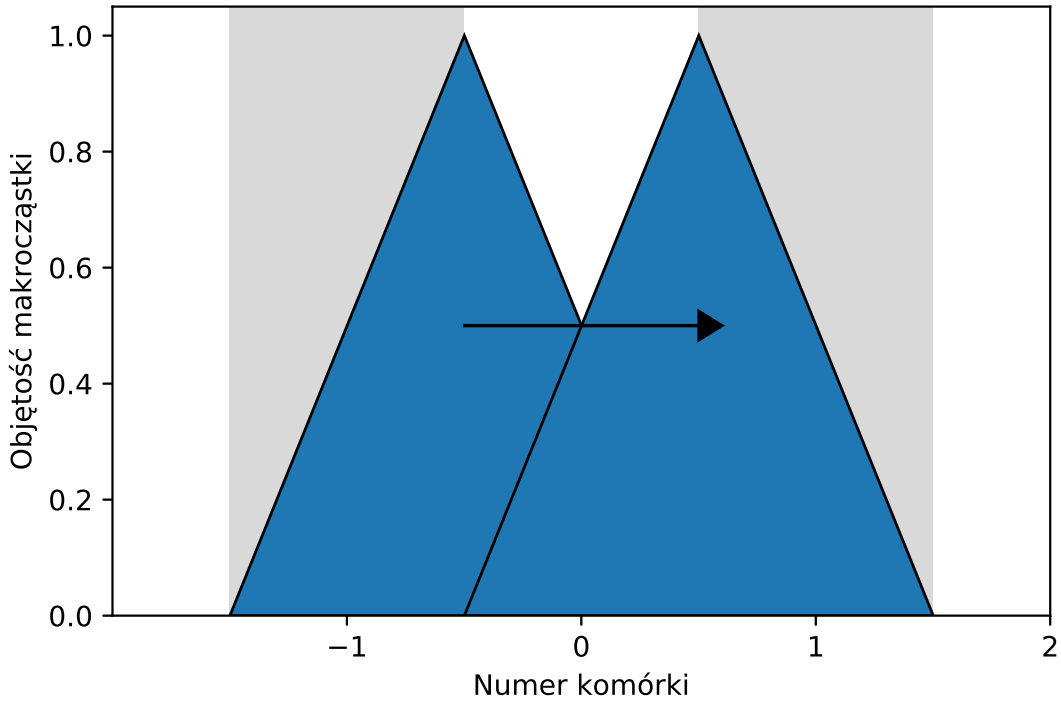
To zaś dyskwalifikuje prostą liniową interpolację jako metodę depozycji prądu, ponieważ chcemy rozwiązywać lokalne równania Ampere'a-Maxwella zamiast liczyć globalne równania Poissona i Gaussa. Jeżeli chcemy uniknąć obliczania poprawek korygujących dywergencję pól, musimy to okupić większą złożonością algorytmu depozycji prądu.

Rozważamy tu zastosowany w bieżącej symulacji kształt cząstki S_1 (trójkątny).

Depozycja prądu jest rozbita na dwie części — prąd podłużny i prąd poprzeczny. Jest to spowodowane tym, że ruch w kierunkach y, z nie powoduje w symulacji przesuwania cząstek, a w x już tak. Obliczenie prądu w kierunkach poprzecznych jest więc jednoznaczne z obliczeniem geometrycznego *przekrycia* — części wspólnej objętości — cząstek i komórek siatki, przez które cząstki przechodzą w trakcie ruchu.

Prędkość cząstek jest ograniczona przez prędkość światła, zaś za krok czasowy przyjmujemy $\Delta t = \Delta x/c$, można więc łatwo zauważyć, że maksymalna odległość, jaką cząstka mogłaby przebyć w jednej iteracji, to Δx. Jeżeli cząstka wystartowałaby środkiem w lewej krawędzi komórki (swoją własną lewą krawędzią sięgając środka poprzedniej komórki, a prawą połowy obecnej komórki), to w czasie ruchu przemieściłaby się przez przez łącznie trzy komórki. Ilustruje to rysunek 4.

Algorytm rozbija ruch cząstek w bieżącej iteracji na etapy. W każdym z etapów cząstka obejmuje swoim zasięgiem inne komórki. Pętla obliczeniowa akumuluje prąd dla cząstek w następujący sposób, zaczynając z przydzielonym czasem w bieżącej iteracji $t = \Delta t$.



Rysunek 4: Ilustracja ruchu cząstki poruszającej się z maksymalną prędkością dozwoloną w symulacji.

3.3.1 Depozycja podłużna

1. obliczany jest czas potrzebny cząstce na dotarcie do kolejnej granicy obszaru

$$t_l = (x - x_g)/v \tag{26}$$

   Granica obszaru x_g jest definiowana jako najbliższa połowa komórki Eulera w kierunku ruchu cząstki.

2. - jeżeli cząstka ma wystarczająco czasu t (spełnia warunek $t > t_l$) aby dotrzeć do kolejnej granicy obszaru, jej prąd zostaje zdepozytowany przez czas t_l,
   - W przeciwnym razie prąd jest depozytowany przez czas t i ruch cząstki kończy się.

   Wkład cząstki do depozytowanego prądu wynosi

$$j_x = qnv_x t/\Delta t \tag{27}$$

   gdzie q to ładunek cząstki, a n to parametr `scaling` oznaczający liczbę rzeczywistych cząstek w makrocząstce.

3. Jeżeli ruch cząstki się nie skończył, zostaje ona (niezależnie od jej faktycznego ruchu w

symulacji) w pętli wewnętrznej, przesunięta za granicę obszaru o $\varepsilon = 10^{-10}\Delta x$. Dodanie ε jest wykonywane w celu zwiększenia jednoznaczności porównywania liczb zmiennoprzecinkowych przy wybieraniu gałęzi algorytmu.

Pętla obliczeniowa wykonuje kolejną iterację dla takiej cząstki, która tym razem ma przydzielony czas $t' = t - t_l$.

Depozytowany prąd w danej iteracji trafia do komórki, w której cząstka zaczynała ruch. W ten sposób można zagwarantować, że cząstka zdeponuje prąd do wszystkich komórek, w których się poruszała.

W każdej iteracji pętli obliczeniowej prąd ze wszystkich cząstek jest akumulowany do tablicy prądów na siatce. Tablica ma rozmiar `NG+3` w przypadku depozycji podłużnej i `NG+4` w przypadku depozycji poprzecznej, co spowodowane jest koniecznością obsłużenia warunków brzegowych. W obecnej symulacji nieokresowej prąd na zewnątrz wewnętrznego obszaru właściwego `NG` jest zerowany, zaś w symulacji okresowej - odbijany na obszar wewnętrzny po przeciwnej stronie siatki.

3.3.2 Depozycja poprzeczna

Algorytm depozycji poprzecznej jest identyczny do depozycji podłużnej, poza samym etapem obliczania wielkości depozytowanego prądu. Jako że symulacja jest jednowymiarowa i cząstki nie wykonują faktycznego ruchu w kierunkach y, z, przyjmujemy liniową interpolację prądów w tych kierunkach jako iloczynów $\vec{j} = q\vec{v}$ ważonych przez przekrycie cząstki z komórkami oraz czas, jaki cząstka spędza w ruchu obejmując dane komórki.

Przekrycie z centrum bieżącej komórki w danej chwili obliczamy jako

$$s_0 = 1 \pm (x' + 0.5) \tag{28}$$

gdzie znak to $+$, gdy cząstka znajduje się w lewej połowie komórki. Zmianę przekrycia w trakcie ruchu, jak i końcowe przekrycie, obliczamy z tym samym znakiem jako

$$s_1 = s_0 \pm \Delta s = s_0 \pm v_x t/dx \tag{29}$$

Aby uzyskać wartość średniego przekrycia cząstki z komórką w trakcie ruchu uśredniamy przekrycie na końcu ruchu z przekryciem na początku ruchu,

$$w = \left(s(x^{n+1}) + s(x^n)\right)/2 \tag{30}$$

Ostatecznie wkład do bieżącej komórki w ciągu jednej iteracji pętli obliczeniowej to $wqnv_{y,z}t/\Delta t$. Zaś do dalszej komórki, w której stronę skierowany jest ruch, jest to $(1-w)qnv_{y,z}t/\Delta t$.

Tablica prądów poprzecznych, do których zostają zebrane, ma rozmiar `(NG+4, 2)`. Jest to spowodowane faktem, że w liniowej depozycji cząstki mogą objąć kształtem maksymalnie dwie komórki, przez co należy dodać komórkę "graniczną" na każdej krawędzi rejonu symulacji.

3.4 Warunek początkowy pola elektrycznego: `solver` globalny, elektrostatyczny

Jako że symulacja jest jednowymiarowa, jeżeli początkowa gęstość ładunku nie jest zerowa, musimy jedynie znaleźć równowagowe pole elektryczne E_x,

Za Birdsallem i Langdonem [1] wychodzimy z równania Poissona 5 i dokonujemy obustronnej transformaty Fouriera w przestrzeni na polu elektrycznym i gęstości ładunku, zakładając możliwość rozłożenia obu tych wielkości na składowe mające następującą zależność od położenia:

$$y(x) = \sum_k y(k) e^{-ikx} \tag{31}$$

Przy tym założeniu dywergencja na skutek zmienności przestrzennej jedynie na osi x zamienia się na operator

$$\nabla \cdot = \frac{\partial}{\partial x} = -ik \tag{32}$$

W związku z tym równanie Poissona5 zamienia się na (po przekształceniu):

$$E(k) = \frac{\rho(k)}{-ik\varepsilon_0} \tag{33}$$

Elementy tablicy k można otrzymać w następujący sposób:

$$k_n = 2\pi n / L \tag{34}$$

Algorytm pozwalający otrzymać równowagowe pole elektrostatyczne w spojrzeniu wysokopoziomowym jest więc relatywnie prosty:

- Używamy algorytmu FFT na gęstości prądu zebranej z cząstek na siatkę
- Dzielimy wynikową tablicę przez $-ik\varepsilon_0$, używając do tego wbudowanego typu `complex` obsługiwanego przez `Numpy` jak i zwykłego Pythona
- Używamy odwrotnej transformaty Fouriera, by otrzymać $E_x(x)$.

Jedynym problemem jest element $k_n = 0$, utrudniający dzielenie. Istnieją dwie możliwości:

- wymuszenie $k_0 = k_1/\text{const}$, gdzie const jest dostatecznie duże (np. 10^6)
- ustawienie $E(k_0) = 0$, co jest jednoznaczne z wyzerowaniem średniego ładunku w obszarze symulacji. Można to interpretować jako ustawienie nieruchomego tła neutralizującego, co jest wykorzystywane w okresowych symulacjach elektrostatycznych.

3.5 Ewolucja czasowa pola elektromagnetycznego

Ewolucja pola elektromagnetycznego opisana jest poprzez równania Maxwella. Jak pokazują Buneman i Villasenor, numerycznie można zastosować dwa główne podejścia: [19]

1. wykorzystać równania na dywergencję pola (prawa Gaussa) do rozwiązania pola na całej

siatce. Niestety, jest to algorytm inherentnie globalny, w którym informacja o warunkach brzegowych jest konieczna w każdej komórce siatki.

2. wykorzystać równania na rotację pola (prawa Ampera i Faradaya), opisujące ewolucję czasową pól. Jak łatwo pokazać (Buneman [19]), dywergencja pola elektrycznego oraz magnetycznego nie zmienia się w czasie pod wpływem tak opisanej ewolucji czasowej.

Co za tym idzie, jeżeli rozpoczniemy symulację od znalezienia pola na podstawie warunków brzegowych i początkowych (gęstości ładunku), możemy już dalej iterować pole na podstawie równań rotacji. Ma to dwie znaczące zalety:

1. algorytm ewolucji pola staje się trywialny obliczeniowo, zwłaszcza w 1D — ogranicza się bowiem do elementarnych operacji lokalnego dodawania i mnożenia.

2. algorytm ewolucji pola staje się lokalny — do znalezienia wartości pola w danym oczku w kolejnej iteracji wykorzystujemy jedynie informacje zawarte w tym właśnie oczku i potencjalnie jego sąsiadach, co zapobiega problemowi informacji przebiegającej w symulacji szybciej niż światło oraz zapewnia stabilność na podstawie warunku Couranta.

W schemacie ewolucji czasowej wykorzystanym w programie wychodzimy z rotacyjnych równań Maxwella 4, 3.

Jako że symulacja zakłada symetrię układu wzdłuż osi propagacji lasera x, możemy przyjąć $\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial z} = 0$. Jednocześnie z prawa Gaussa dla pola magnetycznego wynika $B_x = 0$. Stąd równania dla pola elektrycznego podłużnego oraz pola elektromagnetycznego poprzecznego rozłączają się i można je rozwiązywać praktycznie oddzielnie.

3.5.1 Pole podłużne

$$\left(\nabla \times \vec{B}\right)_x = 0 = \mu_0 \left(j_x + \varepsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t} \right) \tag{35}$$

Składowa podłużna pola jest zatem obliczana poprzez wyrażenie

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{j_x}{\varepsilon_0} \tag{36}$$

a jej dyskretny odpowiednik to:

$$E_i^{n+1} = E_i^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon_0} j_{x,i}^{n+1/2} \tag{37}$$

Z tego powodu bardzo istotnym dla dokładności i stabilności algorytmu staje się sposób depozycji ładunku — należy pilnować, aby był robiony w sposób który spełnia zachowanie ładunku. Inaczej koniecznym staje się aplikowanie tak zwanej poprawki Borysa[20], aby upewnić się, że warunek z równań Gaussa 5,6 jest wciąż spełniony.

Należy zwrócić uwagę, iż w tej wersji pole elektrostatyczne E_x w danej komórce jest aktualizowane jedynie na podstawie informacji w tej właśnie komórce.

3.5.2 Pole poprzeczne

Wyprowadzenie dla pola poprzecznego przedstawimy, za [1], dla składowych E_y oraz B_z. Wyprowadzenie dla E_z, B_y jest analogiczne i przedstawimy jedynie jego wyniki.

Sumując równania 4 oraz przemnożone przez prędkość światła jako prędkość propagacji fali elektromagnetycznej 3 dla składowej $\hat{y}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(E_y + cB_z\right) = -j_y/\varepsilon_0 - c\frac{\partial}{\partial x}\left(E_y + cB_z\right) \tag{38}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(E_y - cB_z\right) = -j_y/\varepsilon_0 + c\frac{\partial}{\partial x}\left(E_y - cB_z\right) \tag{39}$$

Przekształcając:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(E_y + cB_z\right) = -j_y/\varepsilon_0 \tag{40}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(E_y - cB_z\right) = -j_y/\varepsilon_0 \tag{41}$$

Możemy więc uzyskać wielkości $F^+ = E_y + cB_z$ oraz $F^- = E_y - cB_z$ reprezentujące liniowo spolaryzowane fale elektromagnetyczne, które propagują się po siatce z prądem j_y jako wyrazem źródłowym.

Wyniki dla E_z, B_y zrealizowane poprzez wprowadzenie wielkości $G^\pm = E_z \pm cB_y$ przedstawiamy za [1]:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(E_z + cB_y\right) = -j_z/\varepsilon_0 \tag{42}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(E_z - cB_y\right) = -j_z/\varepsilon_0 \tag{43}$$

Finalny schemat jest superpozycją rozwiązań dla $F^\pm$ i $G^\pm$.

Poprzez dobór kroku czasowego symulacji $\Delta t = \Delta x/c$ uzyskujemy trywialną numeryczną propagację wielkości $F^\pm$ [21]:

$$F^{+,n+1}_{i+1} = F^{+,n}_i - \Delta t j_{y\,i+1/2}^{\,n+1/2}/\varepsilon_0 \tag{44}$$

Wielkości z minusem propagują się w lewo, zaś wielkości $G^\pm$ wykorzystują prąd j_z.

Odzyskanie fizycznych pól elektrycznych i magnetycznych jest równie trywialne, na przykład

$$E_y = \left(F^+ + F^-\right)/2 \tag{45}$$

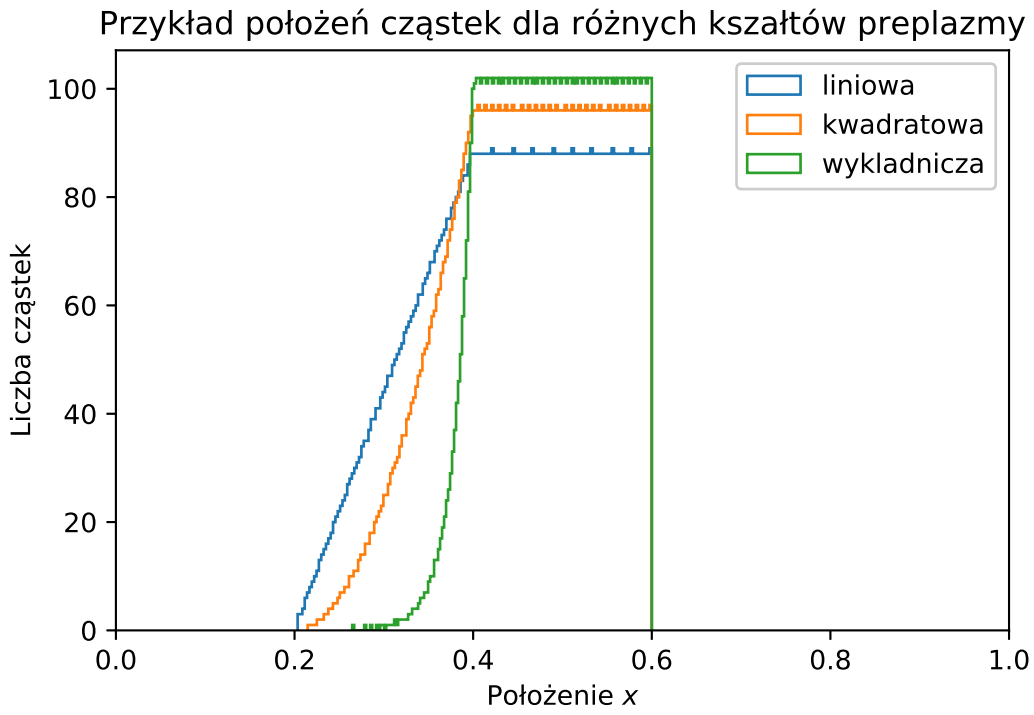
3.6 Warunki początkowe dla cząstek

W celu dobrania warunków początkowych wykorzystuje się algorytm opisany w [1]. Jego działanie można łatwo zilustrować na przykładzie początkowej funkcji gęstości cząstek zadanej dowolną funkcją wyrażoną wzorem analitycznym.

Używając funkcji dystrybucji w jednym wymiarze, zależnej jedynie od położenia i znormalizowanej do liczby cząstek N, można wykonać całkowanie kumulatywne na siatce gęstszej niż liczba cząstek na wybranym przedziale, po czym umieścić cząstki w miejscach, gdzie obliczona dystrybuanta funkcji przybiera kolejne większe całkowite wartości.

Zaimplementowany algorytm jest w stanie przyjąć dowolną funkcję analityczną przybierającą wartości z zakresu $(0, 1)$ i znormalizować ją tak, aby $\int_0^L f(x)dx = N$. W praktyce wykorzystuje się wartość normalizacji marginalnie większą niż N, mianowicie $N + 0.1$, co pozwala na uniknięcie problemów ze skończoną dokładnością obliczeń na liczbach zmiennoprzecinkowych oraz rzutowaniem na liczby całkowite.

W bieżącej wersji symulacji zorientowanej pod symulacje układu tarczy wodorowej istnieją trzy wbudowane rodzaje ustawień początkowych cząstek. Wszystkie trzy składają się z części o jednorodnym rozkładzie gęstości oraz ustawionej przed nią "preplazmy" mającej rozkład gęstości przyrastający z gęstością odpowiednio liniowo, kwadratowo i wykładniczo $(\exp 10x - 10)$.



Rysunek 5: Zaimplementowane w symulacji kształty preplazmy.

W bieżącej wersji kodu prędkości cząstek inicjalizowane są jako zera. Jest to uzasadnione

niewielkim znaczeniem początkowej prędkości cząstek w porównaniu do efektów, jaki ma na nich impuls laserowy.

3.6.1 Warunki brzegowe

Program implementuje dwa rodzaje warunków brzegowych dla cząstek:

- okresowy, do sytuacji o symetrii translacyjnej (cząstka opuszczająca rejon symulacji z prawej strony wraca do niego z lewej strony),
- nieokresowy, do skończonych układów bez symetrii translacyjnej (cząstki opuszczające rejon symulacji zostają usunięte i nie są brane dalej pod uwagę).

Przygotowane są również analogiczne `wrappery` algorytmów obliczeniowych depozycji i interpolacji.

Dla pól możliwe jest dołączenie do symulacji obiektu reprezentującego `Laser`, generującego falę elektromagnetyczną o wybranej polaryzacji na lewej krawędzi obszaru symulacji.

4 Opis i treść kodu PythonPIC

Cały kod programu w celu ułatwienia jego użycia i reprodukowalności wyników tworzony był i jest dostępny[2] na platformie GitHub.

Program ma obiektową strukturę zewnętrzną, którą w celu łatwości zrozumienia jego działania nakrywa wewnętrzną warstwę składającą się głównie z n-wymiarowych tablic `numpy.ndarray` oraz zwektoryzowanych operacji na nich.

Część symulacyjna kodu składa się z kilku prostych koncepcyjnie elementów:

4.1 Grid — siatka Eulera

Klasa reprezentująca dyskretną siatkę Eulera, na której dokonywane są obliczenia dotyczące pól elektromagnetycznych oraz gęstości ładunku i prądu. Zawiera dane historyczne dotyczące wielkości na siatce i linki do plików `.hdf5` przechowujących te wielkości. Posiada dwie subklasy do praktycznych zastosowań w różnego rodzaju symulacjach: `PeriodicGrid` oraz `NonperiodicGrid`.

Zawiera następujące parametry:

- x_i — tablicę położeń lewych krawędzi komórek siatki
- N_G — liczbę komórek siatki
- T — sumaryczny czas trwania symulacji
- Δx — krok przestrzenny siatki — $N_G \Delta x$ daje długość obszaru symulacji
- ρ_i — tablicę gęstości ładunku na siatce.
- $\vec{j}_{i,j}$ — tablicę gęstości prądu na siatce.
- $E_{i,j}, B_{i,j}$ — tablice pól elektrycznego i magnetycznego na siatce.
- c, ε_0 — stałe fizyczne — prędkość światła oraz przenikalność elektryczną próżni.
- Δt — krok czasowy symulacji, obliczony jako $\Delta t = \Delta x / c$.
- N_T — liczbę iteracji czasowych symulacji.
- `BC` — `Boundary Condition`, obiekt zawierający informacje dotyczące warunku brzegowego zadanego na pole elektryczne i magnetyczne. W przypadku symulacji laserowej jest to instancja klasy `Laser` zawierająca informacje o długości fali, kształcie obwiedni i polaryzacji impulsu. W każdej iteracji `BC` poprzez metodę `apply` aktualizuje wartości na lewym brzegu siatki obliczeniowej.

Istotne metody klasy `Grid`, o których należy wspomnieć, to:

- `apply_bc` — aktualizuje krańcowe wartości tablic E, B w oparciu o podany warunek brzegowy (`BC`).
- `gather_current` — zbiera ładunek z cząstek na siatkę
- `gather_charge` — zbiera prąd z cząstek na siatkę
- `init_solve` — uruchamia początkową, spektralną iterację obliczającą równowagowe pole elektrostatyczne na podstawie gęstości ładunku z cząstek
- `solve` — uruchamia iterację ewolucji czasowej pola elektromagnetycznego na podstawie prądów

[2] https://github.com/StanczakDominik/PythonPIC

w symulacji
- `field_function` — interpoluje pola elektryczne i magnetyczne do danych położeń, używane do obliczenia pól w cząstkach
- `save_field_values` — zapisuje dane dotyczące wartości historycznych na siatce w danej iteracji. Należy zaznaczyć, że wielkości na komórkach granicznych nie są zapisywane.
- `postprocess` — przetwarza zebrane w czasie symulacji minimalne informacje dotyczące pól, prądów i ładunków na informacje dotyczące energii

4.2 Species — cząstki

Klasa reprezentująca pewną grupę makrocząstek o wspólnych cechach, takich jak ładunek bądź masa. Przykładowo, w symulacji oddziaływania lasera z tarczą wodorową jedną grupą są protony, zaś drugą — elektrony. Do zainicjalizowania wymaga instancji `Grid`, z której pobiera informacje takie jak stałe fizyczne c, ε_0, liczbę iteracji czasowych N_T i czas trwania iteracji Δt.

Zawiera skalary:
- N — liczba makrocząstek
- q — ładunek cząstki
- m — masa cząstki
- `scaling` — liczba rzeczywistych cząstek, jakie reprezentuje sobą makrocząstka. Jej sumaryczny ładunek wynosi $q*$`scaling`, masa $m*$`scaling`.
- `N_alive` — liczba cząstek obecnie aktywnych w symulacji. Zmniejsza się w miarę usuwania cząstek przez warunki brzegowe.

Poza skalarami zawiera tablice rozmiaru N:
- jednowymiarowych położeń makrocząstek x^n, zapisywanych w iteracjach $n, n+1, n+2\ldots$
- trójwymiarowych prędkości makrocząstek $\vec{v}^{n+\frac{1}{2}}$, zapisywanych w iteracjach $n+\frac{1}{2}, n+\frac{3}{2}, n+\frac{5}{2}\ldots$
- stanu makrocząstek (flagi oznaczające cząstki aktywne bądź usunięte z obszaru symulacji)

Poza tym, zawiera też informacje dotyczące zbierania danych diagnostycznych dla cząstek, niepotrzebnych bezpośrednio w czasie symulacji:
- `name` — słowny identyfikator grupy cząstek, dla potrzeb legend wykresów
- N_T — liczbę iteracji czasowych w symulacji
- N_T^s — zmniejszoną liczbę iteracji, w których następuje pełne zapisanie położeń i prędkości cząstek. Dane te są wykorzystywane do tworzenia diagramów fazowych cząstek.
- odpowiadające poprzednio wymienionym tablice rozmiaru (N_T^s, N), $(N_T^s, N, 3)$.
- jedną tablicę rozmiaru (N_T, N_G) dotyczącą zebranych podczas depozycji ładunku informacji diagnostycznych o przestrzennej gęstości cząstek.
- trzy tablice rozmiaru (N_T) dotyczącą średnich prędkości, średnich kwadratów prędkości i odchyleń standardowych prędkości.

Jeżeli liczba makrocząstek lub iteracji przekracza pewną stałą (rzędu 10^4), dane zapisywane są jedynie dla co n-tej cząstki, gdzie n jest najniższą liczbą całkowitą która pozwala na zmniejszenie tablic poniżej tej stałej.

Warto wspomnieć o następujących metodach klasy `Species`:

- `apply_bc` — aplikuje warunki brzegowe. W symulacjach okresowych jest to przywrócenie cząstek do rejonu symulacji ($x := x\%L$), w symulacjach nieokresowych usunięcie ich.
- `position_push` — przemieszcza cząstki w przestrzeni.
- `velocity_push` — interpoluje pola do pozycji cząstek i aktualizuje ich prędkości na podstawie integratora Borysa.
- `save_particle_values` — zapisuje wartości danych historycznych cząstek.
- `distribute_uniformly` — rozmieszcza cząstki równomiernie na zadanym przedziale
- `distribute_nonuniformly` — rozmieszcza cząstki według zadanej funkcji rozkładu gęstości

Poza tym `Species` zawiera również rozmaite metody służące inicjalizacji prędkości i położeń przy pomocy zaburzeń sinusoidalnych bądź losowych.

4.3 Simulation

Klasa zbierająca w całość `Grid` oraz dowolną liczbę `Species` zawartych w symulacji, jak również pozwalająca w prosty sposób na wykonywanie iteracji algorytmu i analizy danych. Jest tworzona tak przy uruchamianiu symulacji, jak i przy wczytywaniu danych z plików `.hdf5`.

- Δt — krok czasowy
- N_T — liczba iteracji w symulacji
- `Grid` — obiekt siatki
- `list_species` — lista grup makrocząstek w symulacji

Przygotowanie warunków początkowych do danej symulacji polega na utworzeniu nowej klasy dziedziczącej po `Simulation`, która przygotowuje siatkę, cząstki i warunki brzegowe zgodnie z założeniami eksperymentu i wywołuje konstruktor `Simulation`. Należy również przeciążyć metodę `grid_species_initialization`, która przygotowuje warunki początkowe. Domyślna wersja tej metody wykonuje pierwszą, początkową iterację równań ruchu przesuwającą prędkość o $-\Delta t/2$ w tył. To zaś pozwala na zachowanie symplektyczności integratora, co pomaga zachować energię w symulacji. W tym momencie jest też tworzony plik `.hdf5`, do którego zapisywane są dane gromadzone w czasie symulacji.

Aby uruchomić symulację, należy wywołać jedną z metod:

- `run` — podstawowy cykl obliczeń, używany do pomiarów wydajności programu
- `test_run` — obliczenia oraz obróbka danych na potrzeby analizy, głównie stosowana w testach
- `lazy_run` — `test_run` z zapisem do pliku oraz wczytaniem z pliku *.hdf5*, jeżeli początkowe warunki oraz wersja kodu zgadzają się. W przeciwnym razie symulacja zostaje uruchomiona na nowo.

4.4 Pliki pomocnicze

Poza powyższymi program jest podzielony na pliki z implementacjami algorytmów numerycznych, co ułatwia kompilację JIT, pozwala na zwiększenie niezależności testów oraz

zwiększa modularność kodu.

- `BoundaryCondition` — implementacja warunków brzegowych
- `charge_deposition` — depozycja ładunku na siatkę
- `current_deposition` — depozycja prądu podłużnego i poprzecznego na siatkę
- `density_profiles` — profile przestrzenne kształtów preplazmy oraz algorytmy rozkładające cząstki według tych rozkładów.
- `FieldSolver` — spektralne i rotacyjne algorytmy rozwiązywania równań Maxwella na siatce Eulera.
- `particle_push` — implementacja integratorów równań ruchu typu `leapfrog` oraz Borysa.
- `field_interpolation` — interpolacja pól elektromagnetycznych z położeń na siatce do cząstek.

Katalog `visualization` zawiera wizualizacje danych.

- `animation` — tworzy animacje dla celów analizy danych
- `time_snapshots` — implementacje wykresów zależnych od czasu, ilustrujących stan symulacji w danej iteracji.
- `static_plots` — tworzy statyczne wykresy dla celów analizy danych
- `plotting` — zawiera ustawienia dotyczące analizy danych

Przygotowane konfiguracje istniejących symulacji są zawarte w katalogu `configs`, zaś algorytmiczne testy jednostkowe są zawarte w katalogu `tests`.

5 Wykorzystane oprogramowanie i biblioteki Pythona

Pomijamy tutaj bibliotekę standardową jako wbudowaną w sam język, skupiając się na przydatnych bibliotekach zewnętrznych.

5.1 Numpy

`Numpy` [22] to biblioteka umożliwiająca wykonywanie złożonych obliczeń na n-wymiarowych macierzach bądź tablicach, utworzona w celu umożliwienia zastąpienia operacjami wektorowymi iteracji po tablicach, powszechnie stosowanych w metodach numerycznych i będących znanym słabym punktem Pythona.

Pod zewnętrzną powłoką zawiera odwołania do znanych, wypróbowanych i sprawdzonych w nauce modułów `LAPACK`, `BLAS` napisanych w szybkich, niskopoziomowych językach C oraz `FORTRAN`. Jest to *de facto* standard większości obliczeń numerycznych w Pythonie.

Należy zauważyć, że operacje matematyczne w wersji `numpy` zawartej w popularnej dystrybucji Anaconda są automatycznie zrównoleglane tam, gdzie pozwala na to niezależność obliczeń dzięki dołączonym bibliotekom Intel Math Kernel Library.[23]

Numpy jest oprogramowaniem otwartym, udostępnianym na licencji BSD.

5.2 scipy

Kolejną podstawową biblioteką w numerycznym Pythonie jest `scipy`[24], biblioteka zawierająca wydajne gotowe implementacje wielu powszechnych algorytmów numerycznych służących między innymi całkowaniu, optymalizacji funkcji rzeczywistych, uczeniu maszynowemu, algebrze liniowej czy transformatom Fouriera.

5.3 Numba

`Numba` to biblioteka służąca do kompilacji just-in-time wysokopoziomowego kodu Pythona do kodu niskopoziomowego przy pierwszym uruchomieniu programu. W wielu przypadkach pozwala na osiągnięcie kodem napisanym w czystym Pythonie wydajności marginalnie niższej bądź nawet równej do analogicznego programu w C bądź Fortranie. [25]

Jednocześnie należy zaznaczyć prostotę jej użycia. W wielu przypadkach wystarczy dodać do funkcji dekorator `@numba.jit`:

Listing 1: Przykład zastosowania kompilacji just-in-time z biblioteki Numba wykorzystujący metody pomiaru czasu środowiska Jupyter.

```
1 import numba
2 import numpy
3
4 def sqrt(x):
5     return x**0.5
```

```
6
7  sqrt_jitted = numba.njit(sqrt)
8
9  @numba.njit
10 def sqrt_jitted_as_decorator(x):
11     return x**0.5
12
13 x = numpy.arange(100000)
14
15 #%timeit sqrt(x)
16 # 49.4 ms +- 8.77 ms per loop (mean +- std. dev. of 7 runs, 10 loops each)
17
18 #%timeit sqrt_jitted(x)
19 # 4.66 ms +- 70.3 us per loop (mean +- std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
20
21 #%timeit sqrt_jitted_as_decorator(x)
22 # 4.38 ms +- 50.8 us per loop (mean +- std. dev. of 7 runs, 1 loop each)
```

Istniejącym od niedawna kodem symulacyjnym implementującym tą metodę jest FBPIC[14].

5.4 HDF5

HDF5 jest wysokowydajnym formatem plikow służącym przechowywaniu danych liczbowych w drzewiastej, skompresowanej strukturze danych, razem z równoległym, wielowątkowym zapisem tych danych. W Pythonie implementuje go biblioteka h5py[26].

W bieżącej pracy wykorzystuje się go do przechowywania danych liczbowych dotyczących przebiegu symulacji, pozwalających na ich dalsze przetwarzanie i analizę poprzez wizualizację.

5.5 matplotlib

Do wizualizacji danych z symulacji (oraz tworzenia schematów w sekcji teoretycznej niniejszej pracy) użyto własnoręcznie napisanych skryptów w uniwersalnej bibliotece graficznej `matplotlib`[27]. `matplotlib` zapewnia wsparcie zarówno dla grafik statycznych w różnych układach współrzędnych (w tym 3D), jak również dla dynamicznie generowanych animacji przedstawiających przebiegi czasowe symulacji.

5.6 py.test

Przy pracy nad kodem użyto frameworku testowego `py.test` [28]. Tworzenie testów jest trywialne:

Listing 2: Podstawowy przykład testu w pliku `func.py`

```
1  def f(x):
2      return 3*x
3
4
5  def test_passing():
6      assert f(4) == 12
7
8
9  def test_failing():
10     assert f(4) == 13
```

Uruchamianie zaś:

```
>>> pytest func.py
=== FAILURES ===
___failing ___

    def test_failing():
>       assert f(4) == 13
E       assert 12 == 13
E        +  where 12 = f(4)

func.py:10: AssertionError
=== 1 failed, 1 passed in 0.10 seconds ===
```

Należy zaznaczyć, że w symulacjach numerycznych, gdzie błędne działanie programu nie objawia się zazwyczaj formalnym błędem, a jedynie błędnymi wynikami, dobrze zautomatyzowane testy jednostkowe potrafią zaoszczędzić bardzo dużo czasu na debugowaniu poprzez automatyzację uruchamiania kolejnych partii kodu i lokalizację błędnie działających części algorytmu. Dobrze napisane testy są praktycznie koniecznością w dzisiejszych czasach, zaś każdy nowo powstały projekt symulacyjny powinien je wykorzystywać, najlepiej do weryfikacji każdej części algorytmu z osobna.

Dobrym przykładem skutecznego testu jednostkowego jest porównanie energii kinetycznej elektronu o znanej prędkości z wartością tablicową, zawarte jako test w pliku `pythonpic/tests/test_species.py`.

`py.test` jest oprogramowaniem otwartym, dostępnym na licencji MIT.

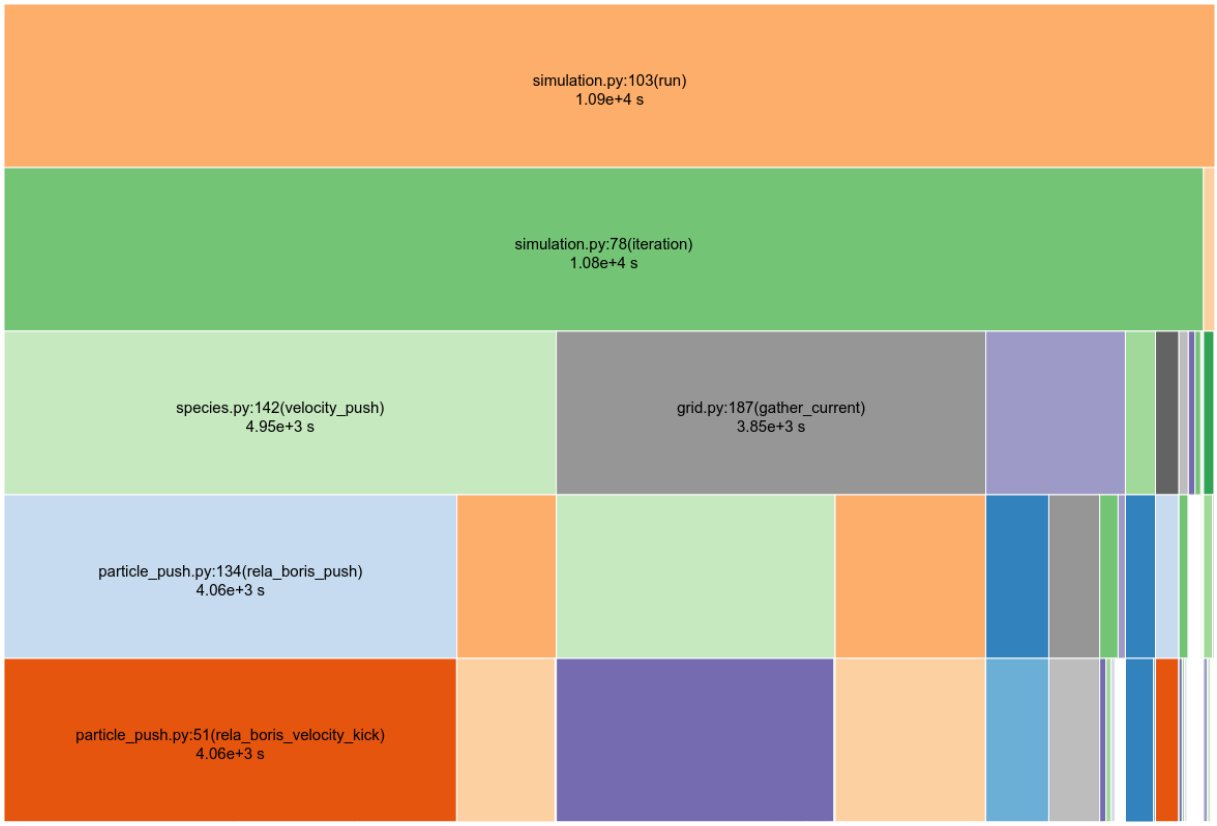
5.7 Travis CI

Nieocenionym narzędziem w pracy nad kodem był system ciągłej integracji (*continuous integration*) Travis CI [29] dostępny za darmo dla projektów open-source. Travis pobiera aktualne wersje kodu przy każdej aktualizacji wersji dostępnej na serwerze GitHub i uruchamia testy, zwracając komunikat o ewentualnym niepowodzeniu i pozwalając na jednoczesne uruchamianie

bieżących, intensywnych symulacji przy jednoczesnym weryfikowaniu w chmurze poprawności działania lżejszych, acz wciąż intensywnych symulacji testowych i testów algorytmicznych.

5.8 snakeviz

W optymalizacji przydatny okazał się program `snakeviz`[30] dostępny na GitHubie i pozwalający na wizualizację wyników z profilowania symulacji. Pozwala w wygodny sposób zbadać, które fragmenty kodu najbardziej spowalniają symulację, które są najlepszymi kandydatami do optymalizacji, oraz jak skuteczne (bądź nieskuteczne) okazują się próby polepszenia ich wydajności. Działanie programu ilustruje rysunek 6.



Rysunek 6: Wizualizacja szybkości działania poszczególnych fragmentów kodu wygenerowana programem `snakeviz`.

5.9 cProfile

Uruchamianie kodu w celu zmierzenia wydajności całkowitej polegało na uruchomieniu skryptu `make benchmark`, który:

1. Czyści zawartość folderu `data_analysis`, aby przeprowadzić obliczenia od początku bez wczytywania poprzednich danych
2. Uruchamia środowisko Anaconda zawierające bardziej zoptymalizowane od zwyczajnych

wersje biblioteki Numpy

3. Uruchamia skrypt `fulllaser.py` w trybie `cProfile` i zapisuje dane do pliku `benchmark.prof`

```
python -m cProfile -o benchmark.prof fulllaser.py
```

Następnie zapisane dane są wizualizowane programem `snakeviz`.

Za wskaźnik efektów optymalizacji przyjęto całkowity czas trwania symulacji oraz ułamek tego czasu spędzony w metodzie `iteration` klasy `Simulation`.

5.10 IPython, `%timeit`

Do optymalizacji niewielkich fragmentów kodu wykorzystano środowisko Jupyter (dawniej IPython) Notebook [9]. Użycie "magicznych"[3] komend `%timeit` pozwala na automatyczne profilowanie wydajności niewielkich fragmentów kodu. Przykładem zastosowania tej komendy jest listing 5.3.

[3] `Magic command` to faktyczny termin z dokumentacji IPythona na komendę poprzedzoną dla wyróżnienia znakiem %, niezawierającą się w samej składni podstawowego Pythona, wprowadzoną dla ułatwienia operacji częstych w tym środowisku. Jest to w pewien sposób rodzaj makra.

6 Część weryfikacyjna

Niniejsza analiza przeprowadzona została na “finalnej” w chwili pisania niniejszej pracy wersji programu. W repozytorium Git na GitHubie jest to commit `480154c9c8d21350e8761e3320ede5f63bbb9ef5`.

6.1 Przypadki testowe

Kod przetestowano w dwojaki sposób. Pierwszym z nich są testy jednostkowe. Automatyczne testy jednostkowe uruchamiane po każdej wymiernej zmianie kodu pozwalają kontrolować działanie programu znacznie ułatwiają zapobieganie błędom.

Poszczególne algorytmy podlegały testom przy użyciu ogólnodostępnego pakietu `pytest` 5.6 i w większości były uruchamiane na platformie TravisCI.

6.1.1 Testy algorytmiczne

Testy algorytmiczne polegały na przeprowadzeniu fragmentu symulacji — w przypadku testów algorytmów było to na przykład wygenerowanie pojedynczej cząstki o jednostkowej prędkości oraz zdepozytowanie jej gęstości prądu na siatkę, co pozwala porównać otrzymany wynik z przewidywanym analitycznie dla danego rozmiaru siatki i położenia cząstki.

- `Gather` — `test_current_deposition`, `test_charge_deposition`
  - Depozycja prądu lub ładunku z pojedynczej cząstki na niewielką siatkę i porównanie z wynikiem analitycznym[21]
  - Depozycja prądu lub ładunku z dwóch pojedynczych cząstek na niewielką siatkę i porównanie z sumą prądów lub ładunków dla obu pojedynczyczh cząstek
  - Depozycja prądu z dużej ilości równomiernie rozłożonych cząstek — weryfikacja średniej wartości prądu
  - Depozycja prądu lub ładunku z cząstek blisko granic i porównanie z zamierzonymi warunkami brzegowymi
  - Depozycja prądu dla cząstki poruszającej się powyżej prędkości światła — procedura depozycji zwraca błąd
- `Solve` — `test_FieldSolver`, `test_LongitudinalSolver`
  - Test `solvera` spektralnego poprzez rozwiązanie równania Poissona dla sinusoidalnej, deltowej i rosnącej liniowo dystrybucji ładunku. Weryfikacja dokładności rozwiązania i energii pola
  - Test `solvera` rotacyjnego poprzez porównanie z rezultatami analitycznymi dla pojedynczych iteracji

- `Scatter` — `test_field_interpolation` — porównanie interpolowanego pola z przypadkiem analitycznym dla kilku prostych rozkładów pola
- `Push` — `test_pusher`
  - Ruch w jednorodnym polu elektrycznym wzdłuż osi układu, w wersji nierelatywistycznej i relatywistycznej. Prędkość cząstki rośnie jednostajnie w reżimie nierelatywistycznym.
  - Relatywistyczny i nierelatywistyczny ruch kołowy z zachowaniem energii w jednorodnym polu magnetycznym w kierunku osi $\hat{z}$.
  - Relatywistyczny ruch w potencjale oscylatora harmonicznego. Ruch cząstki jest porównany z trajektorią obliczoną analitycznie w przypadku relatywistycznym.
  - Zachowanie energii ruchu cząstki bez pola elektrycznego przy wysoce relatywistycznej prędkości, w kierunku ruchu oraz z prędkościami w trzech wymiarach.
  - Test dryfu $\vec{E} \times \vec{B}$ — cząstka w skrzyżowanych polach elektrycznym i magnetycznym uzyskuje stabilną prędkość E/B.
  - Test warunków brzegowych dla symulacji okresowych — zachowanie liczby cząstek przechodzących przez granicę obszaru symulacji.
  - Test warunków brzegowych dla symulacji okresowych — spadek liczby cząstek przechodzących przez granicę obszaru symulacji do zera.

6.2 Testy symulacyjne — przypadki elektrostatyczne

Testy symulacyjne polegały na uruchomieniu niewielkiej symulacji testowej z różnymi warunkami brzegowymi i ilościowym, automatycznym bądź jakościowym, wizualnym zweryfikowaniu dynamiki zjawisk w niej zachodzących.

Zastosowano kod do symulacji kilku znanych problemów w fizyce plazmy:

6.2.1 oscylacje zimnej plazmy

Jest to efektywnie elektrostatyczna fala stojąca. Symulacja zaczyna z ujemnymi cząstkami o zerowej prędkości początkowej, rozłożonymi w okresowym pudełku symulacyjnym równomiernie z nałożonym na nie sinusoidalnym zaburzeniem:

$$x = x_0 + x_1 \tag{46}$$

$$x_0 = L * n/N \tag{47}$$

$$x_1 = A\sin(kx_0) = A\sin(2\pi n x_0/L) \tag{48}$$

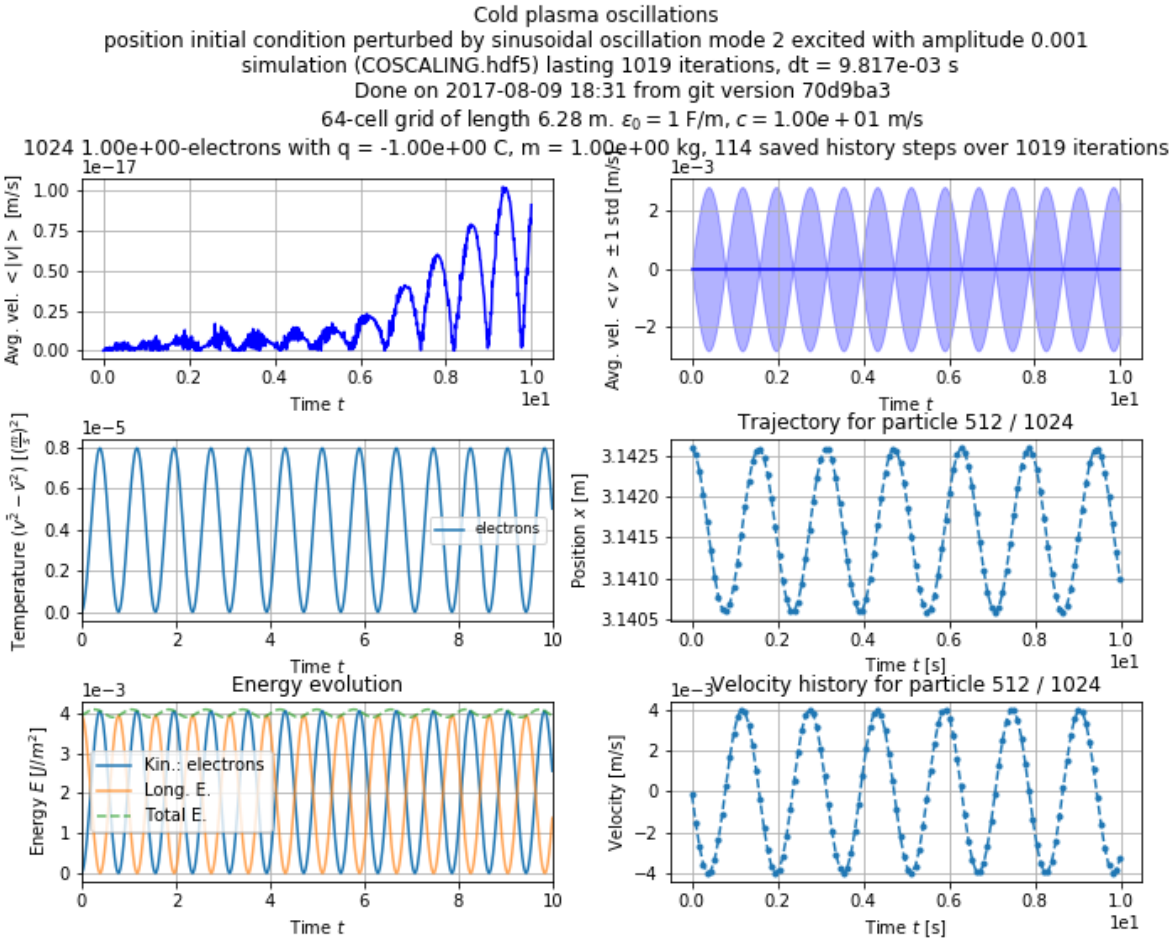
Określenie “zimna plazma” bierze się z nietermalnego, deltowego rozkładu prędkości cząstek — jest to faktycznie strumień cząstek o stałej (w tym szczególnym przypadku zerowej) prędkości.

6. WERYFIKACJA

Sumaryczny ładunek w obszarze symulacji jest ustawiony na zero w pierwszym kroku algorytmu rozwiązywania pola elektrycznego poprzez wyzerowanie zerowej składowej fourierowskiej gęstości ładunku, co jest jednoznaczne z przyjęciem nieskończenie masywnych i nieruchomych jonów dodatnich dokładnie neutralizujących gęstość ładunku elektronów.

Sytuacja ta pozwala na obserwację oscylacji cząstek wokół ich stabilnych położeń równowagi. W przestrzeni fazowej x, V_x cząstki zataczają efektywnie elipsy, co pozwala wnioskować że ruch ten jest z dobrym przybliżeniem harmoniczny. Oczywiście, nie jest to do końca oscylacja harmoniczna z powodu odchyleń pola interpolowanego z Eulerowskiej siatki od generowanego faktycznym potencjałem $\sim x^2$.

Symulacja ta jest wykorzystywana do weryfikacji podstawowych warunków, jakie powinna spełniać symulacja elektrostatyczna — na przykład długofalowe zachowanie energii, liczby cząstek (w układzie okresowym cząstki nie powinny znikać).



Rysunek 7: Oscylacje zimnej plazmy w reżimie liniowym. Cząstki wykonują prawie harmoniczne oscylacje wokół swoich położeń równowagi, zaś energia w układzie jest wymieniana między energią kinetyczną cząstek a energią pola elektrostatycznego. Jako wyjście programu, wykresy z *PythonPIC* w bieżącym rozdziale zamieszczane są w języku angielskim.

Liniowy reżim obserwacji jest zaznaczony na rysunku 7.

6.2.2 niestabilność dwóch strumieni

W tym przypadku symulacja również zawiera zimną plazmę, lecz tym razem są to dwa strumienie ujemnych cząstek o stałych, przeciwnych sobie prędkościach v_0 oraz $-v_0$.

Dla niewielkich prędkości początkowych strumieni obserwuje się liniowy reżim oscylacji cząstek — oba strumienie pozostają stabilne. Obserwuje się niewielkie oscylacje oraz grupowanie się cząstek w rejony koherentnej większej gęstości wewnątrz strumienia (opisany przez Birdsalla i Langdona *bunching*).

Dla dużych prędkości obserwuje się nieliniowe zachowanie cząstek w przestrzeni fazowej. Oscylacje prędkości cząstek przybierają rząd wielkości porównywalny z początkową różnicą prędkości strumieni. Strumienie zaczynają się mieszać ze sobą nawzajem, zaś cały układ się termalizuje. Energia kinetyczna uporządkowanego ruchu strumieni zamienia się w energię potencjalną pola równowagowego oraz termalną energię kinetyczną, co sprawia, że średnia prędkość obu strumieni ulega zmniejszeniu [1].

To oraz stabilność symulacji o warunkach początkowych w obu reżimach jest obiektem automatycznych testów sprawdzających poprawność symulacji.

6.3 Testowe symulacje elektromagnetyczne — propagacja fali

W tym przypadku symulacja nie zawiera plazmy, a badana jest jedynie propagacja fali elektromagnetycznej w obszarze symulacji dla różnych charakterystyk czasowych.

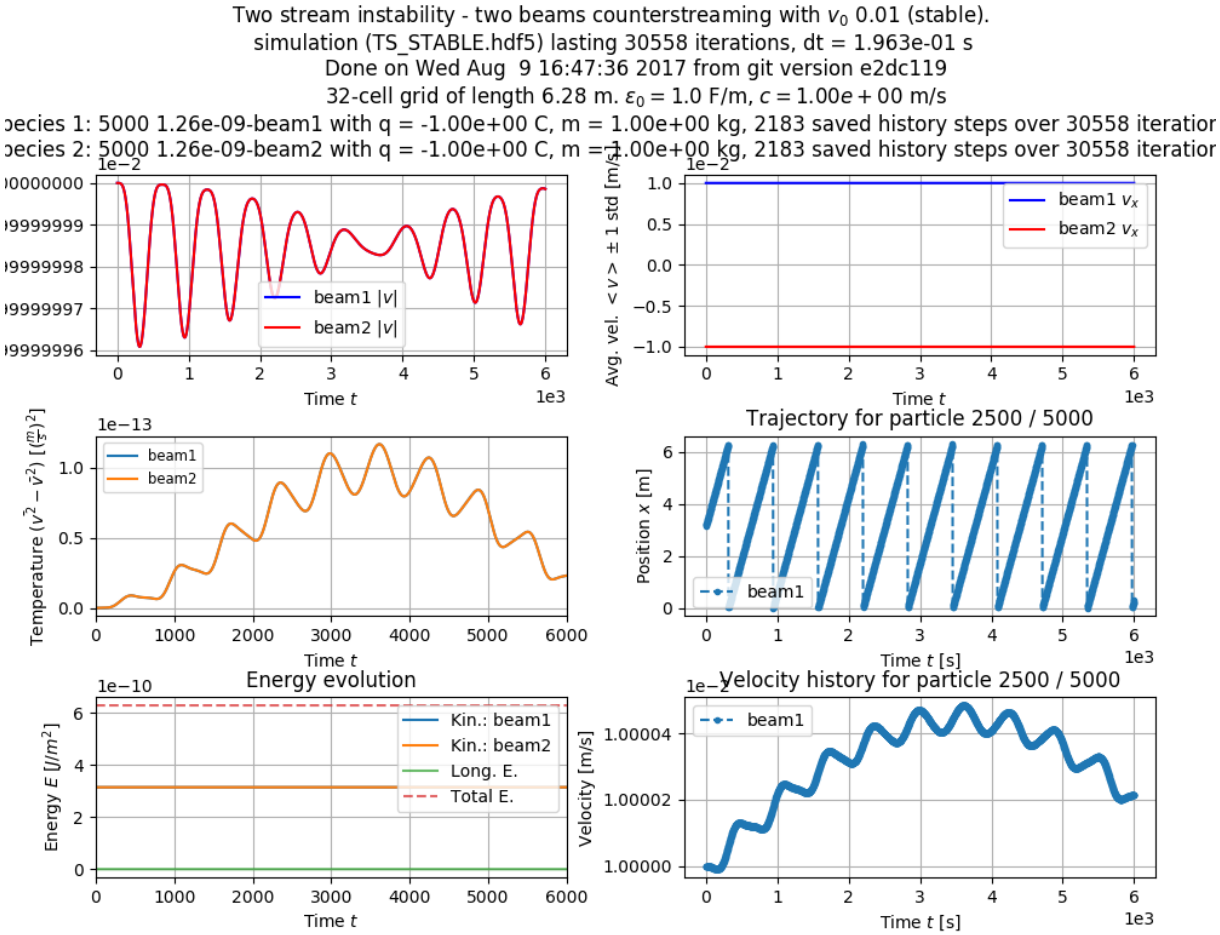
Testy jednostkowe obejmują zachowanie energii weryfikowane poprzez zgodność energii pola elektromagnetycznego w symulacji ze strumieniem Poyntinga generowanym przez warunek brzegowy.

6.4 Symulacja elektromagnetyczna — oddziaływanie wiązki laserowej z tarczą wodorową

Jest to sytuacja, która od początku rozwoju programu miała być głównym celem istnienia kodu. Szerzej została opisana w 2.3.

Jako warunki początkowe przyjęto plazmę rozbitą na dwie części — *preplazmę* o narastającej funkcji rozkładu gęstości oraz plazmę właściwą o stałej gęstości. Funkcja gęstości jest generowana automatycznie poprzez metodę opisaną w [1] i jest normalizowana do danego poziomu maksymalnej gęstości w obszarze plazmy właściwej przy zadanej liczbie makrocząstek.

Początkowe prędkości cząstek przyjęto jako zerowe, zaś początkowe położenia elektronów są identyczne z położeniami początkowymi protonów. Jest to prosta w inicjalizacji, inherentnie równowagowa sytuacja (gwarantująca nie tylko kwaziobojętność elektryczną plazmy, ale również całkowitą obojętność początkowego układu) do czasu przybycia lasera. Należy również zauważyć, że przy zakładanych energiach lasera jakakolwiek termalna dynamika układu przed interakcją



Rysunek 8: Stabilny reżim dla układu dwóch strumieni. Widoczne są jedynie cykliczny ruch jednostajny w obszarze symulacji i niewielkie zmiany prędkości cząstki. Moduł prędkości strumienia 1 dokładnie śledzi moduł prędkości strumienia 2, więc nie jest widoczny na wykresie w lewym górnym rogu.

zostanie szybko wymazana. Jest to więc akceptowalne przybliżenie.

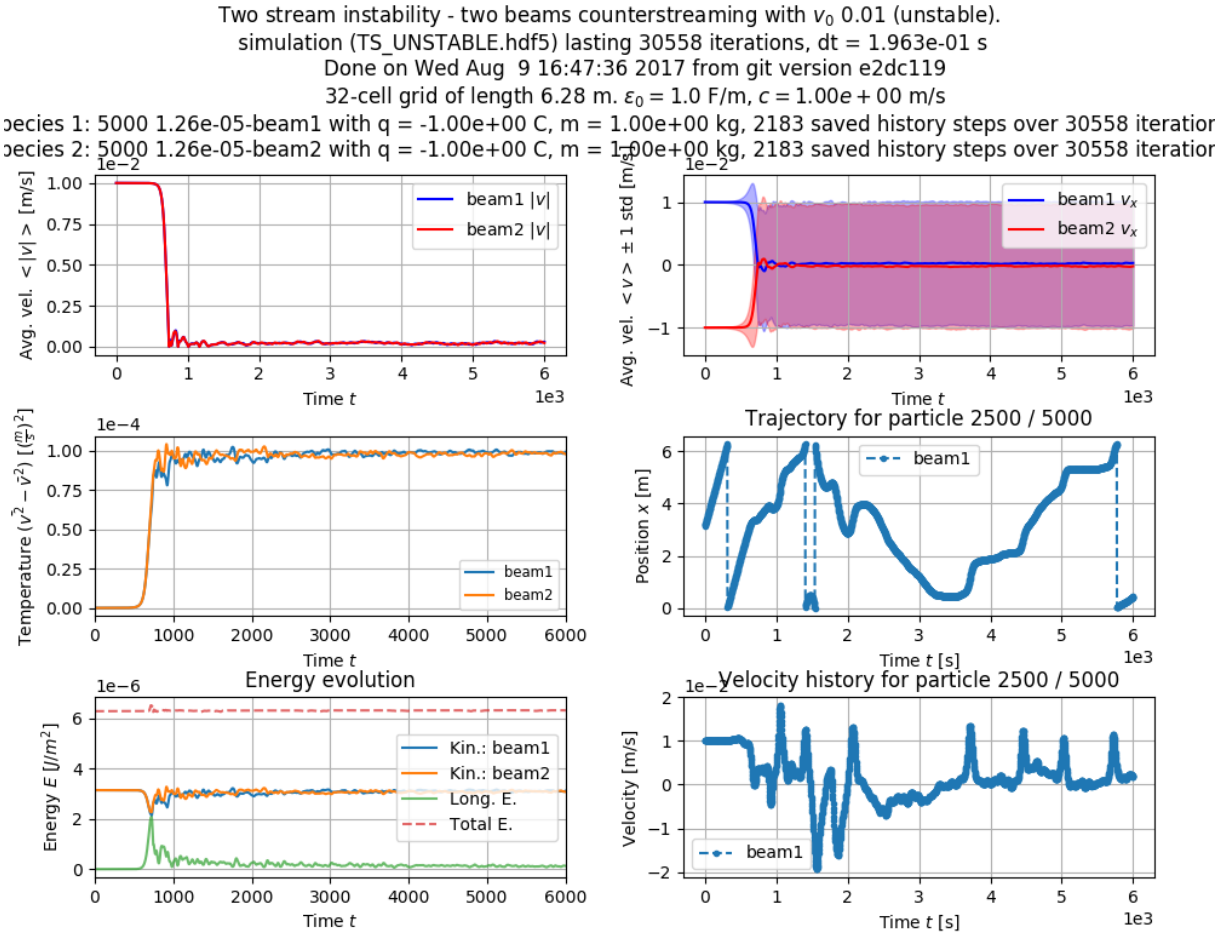
Za intensywność lasera przyjęto wielkości $10^{21}, 10^{22}, 10^{23} W/m^2$, zaś za jego długość fali 1.064 μm (jest to laser Nd:YAG). Przeprowadzono badania w polaryzacjach liniowej (pole elektryczne w kierunku osi $\hat{y}$ — nie zaobserwowano znaczących różnic w symulacji, w której pole elektryczne skierowano w kierunku osi $\hat{z}$) oraz kołowej wiązki laserowej.

Długość obszaru symulacji to około 10.6μm, podzielone na 1378 komórek siatki.

Dla mocy lasera do $10^{22} J/m^2$ przy polaryzacji liniowej laser zostaje w większości wytłumiony i odbity przez plazmę. Obserwuje się generację niewielkich oscylacji wysokiej częstotliwości emitowanych w kierunku $+\hat{x}$. Widać to zwłaszcza w przypadku polaryzacji kołowej.

Dla wszystkich przypadków od $10^{22} J/m^2$ obserwuje się spłaszczenie preplazmy w kierunku plazmy głównej.

Dla mocy lasera $10^{23} J/m^2$ przy polaryzacji liniowej obserwuje się znaczące przejście wiązki laserowej przez warstwę plazmy oraz silne zniszczenie początkowego rozkładu przestrzennego

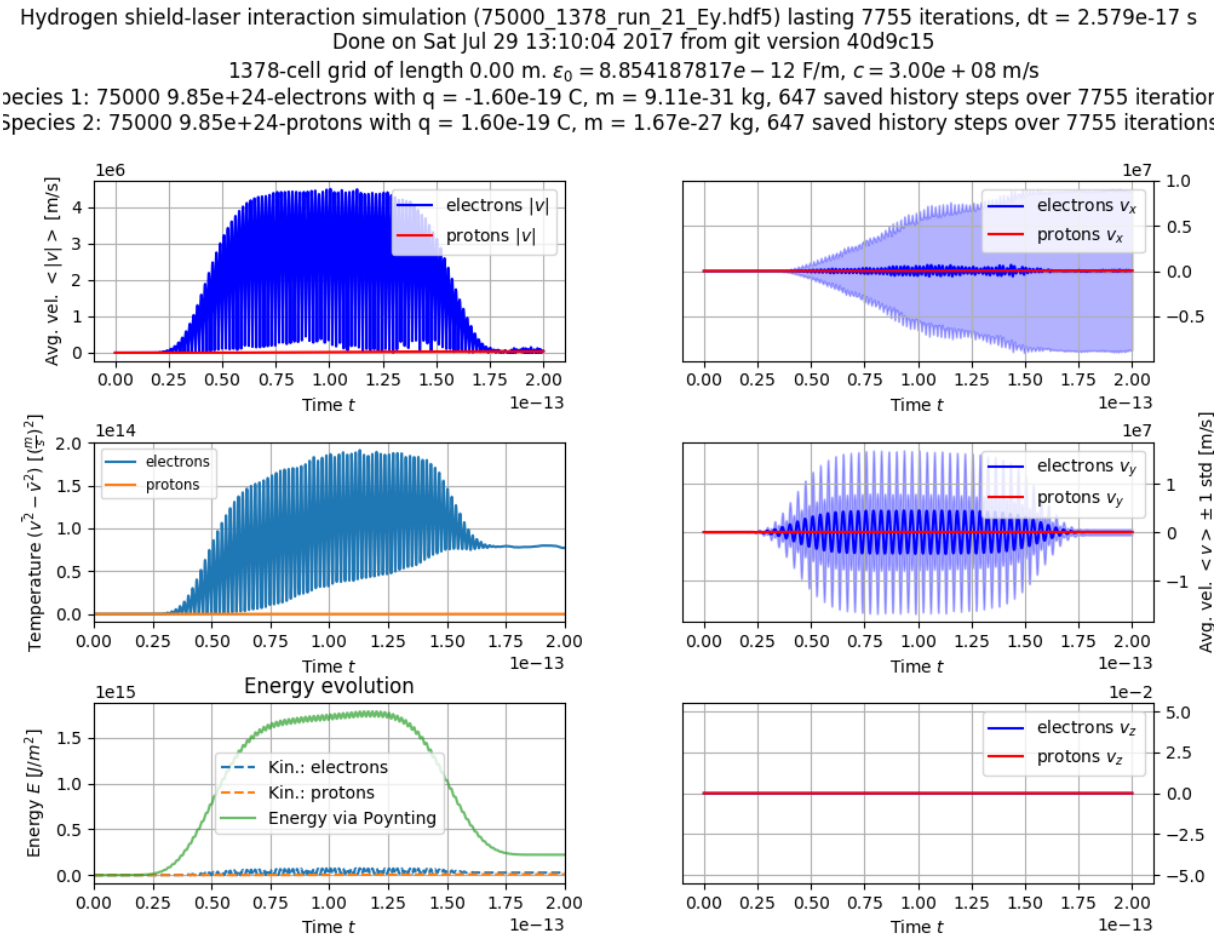


Rysunek 9: Niestabilny reżim dla układu dwóch strumieni. Trajektoria cząstki staje się chaotyczna.

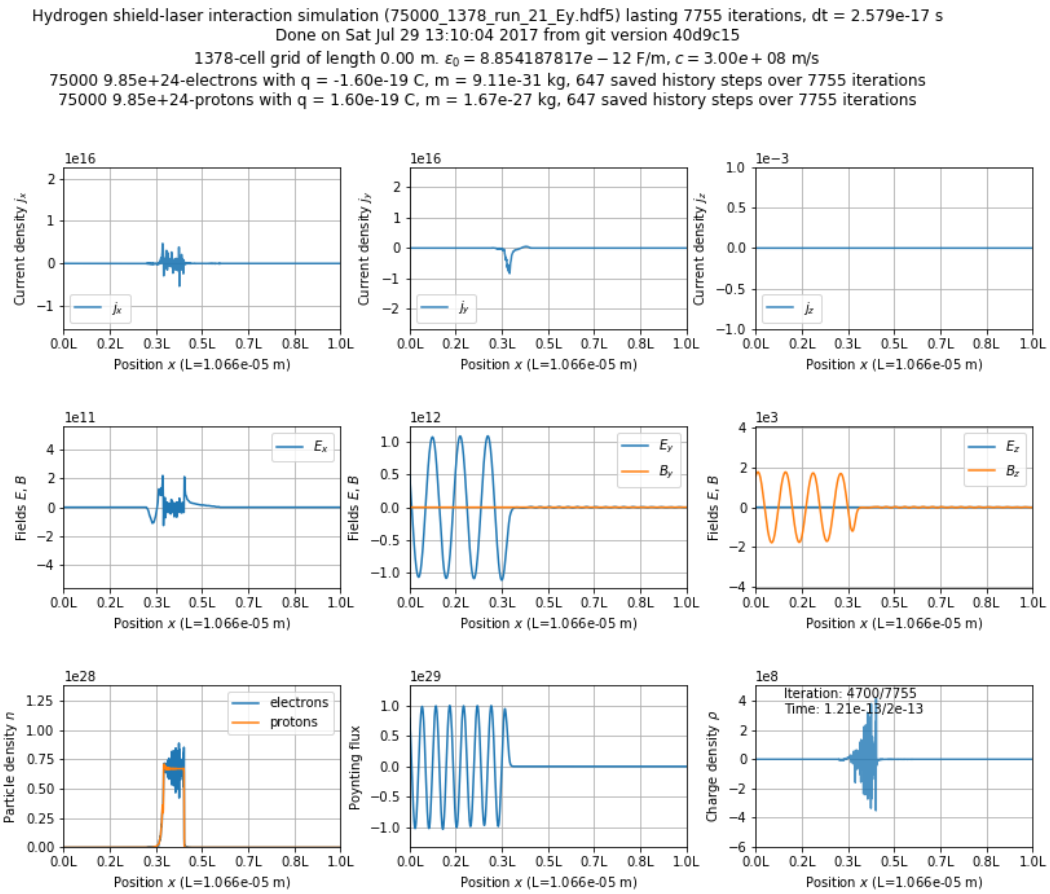
plazmy, z przejściem do termalizacji. Gęstości obu rodzajów cząstek uzyskują rozkład normalny.

Wizualizacje symulacji tarczy wodorowej przedstawiono na rysunkach 10–15.

6. WERYFIKACJA

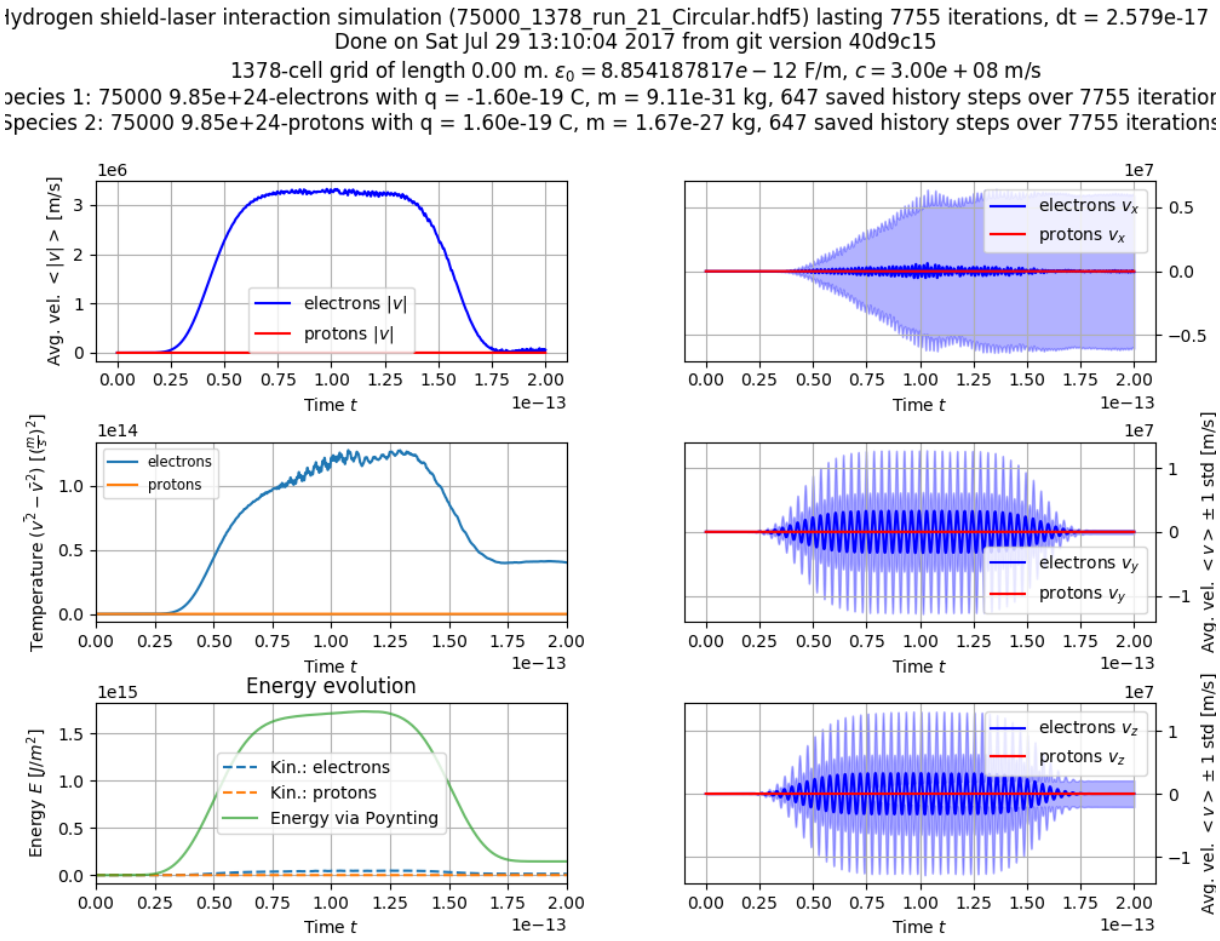


Rysunek 10: Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja liniowa.

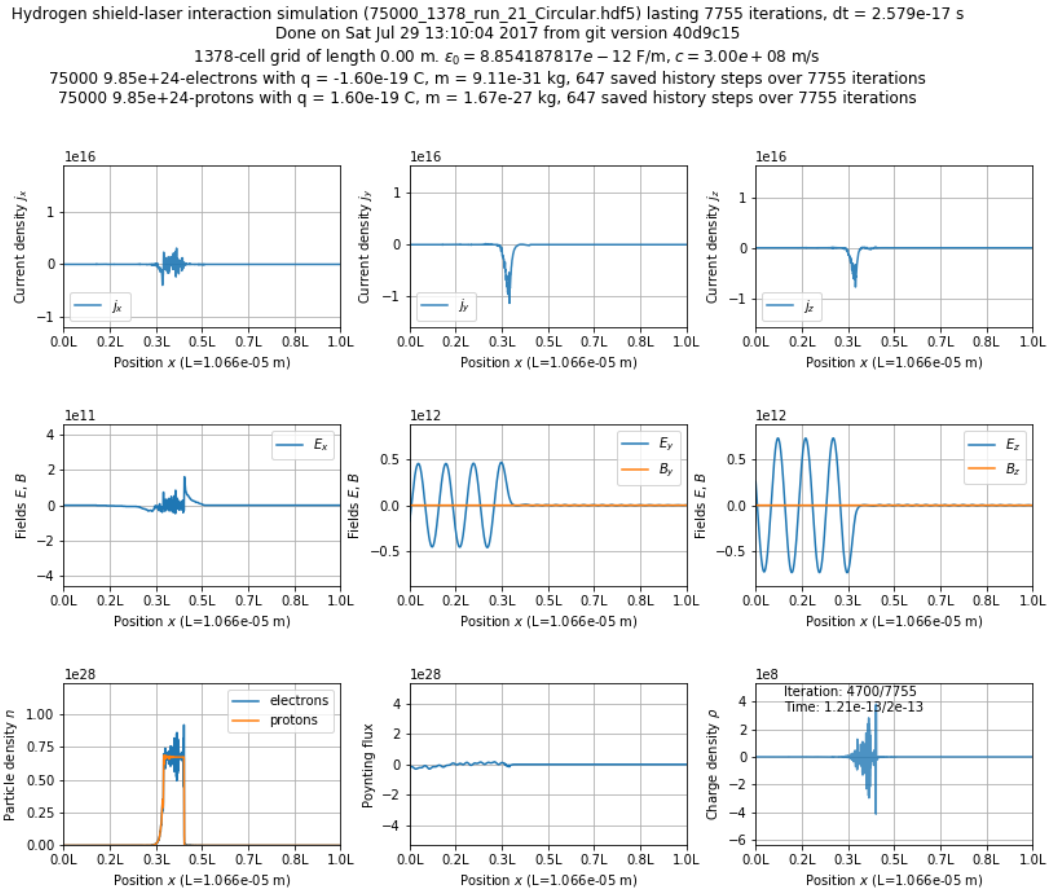


Rysunek 11: Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja liniowa. Rzut na iterację 4700/7755.

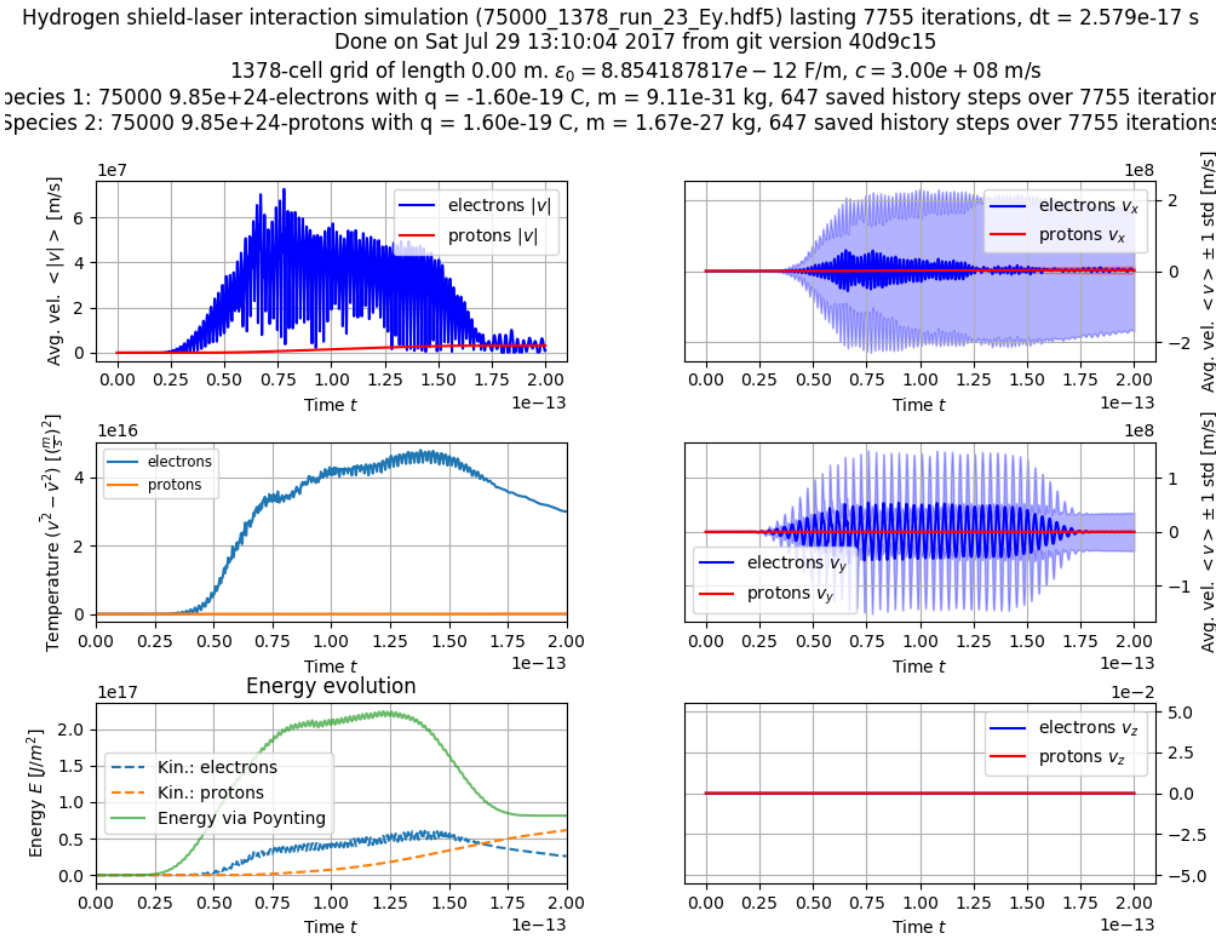
6. WERYFIKACJA



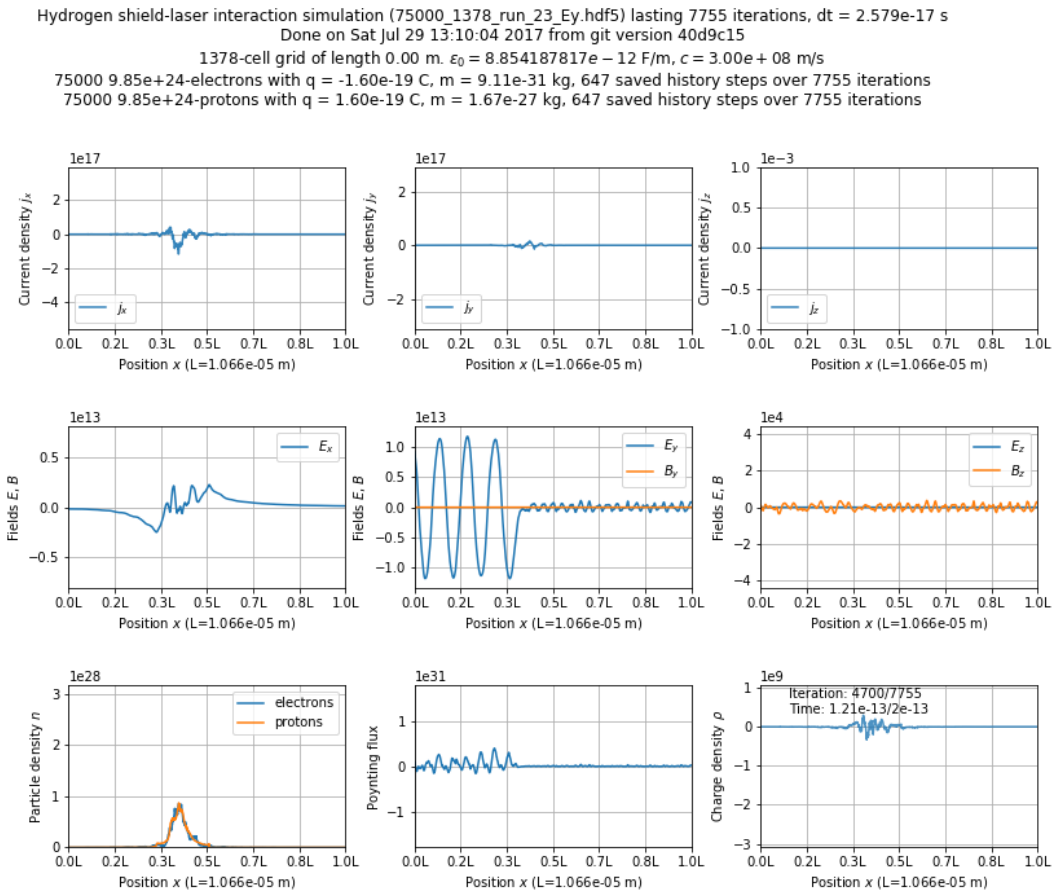
Rysunek 12: Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja kołowa.



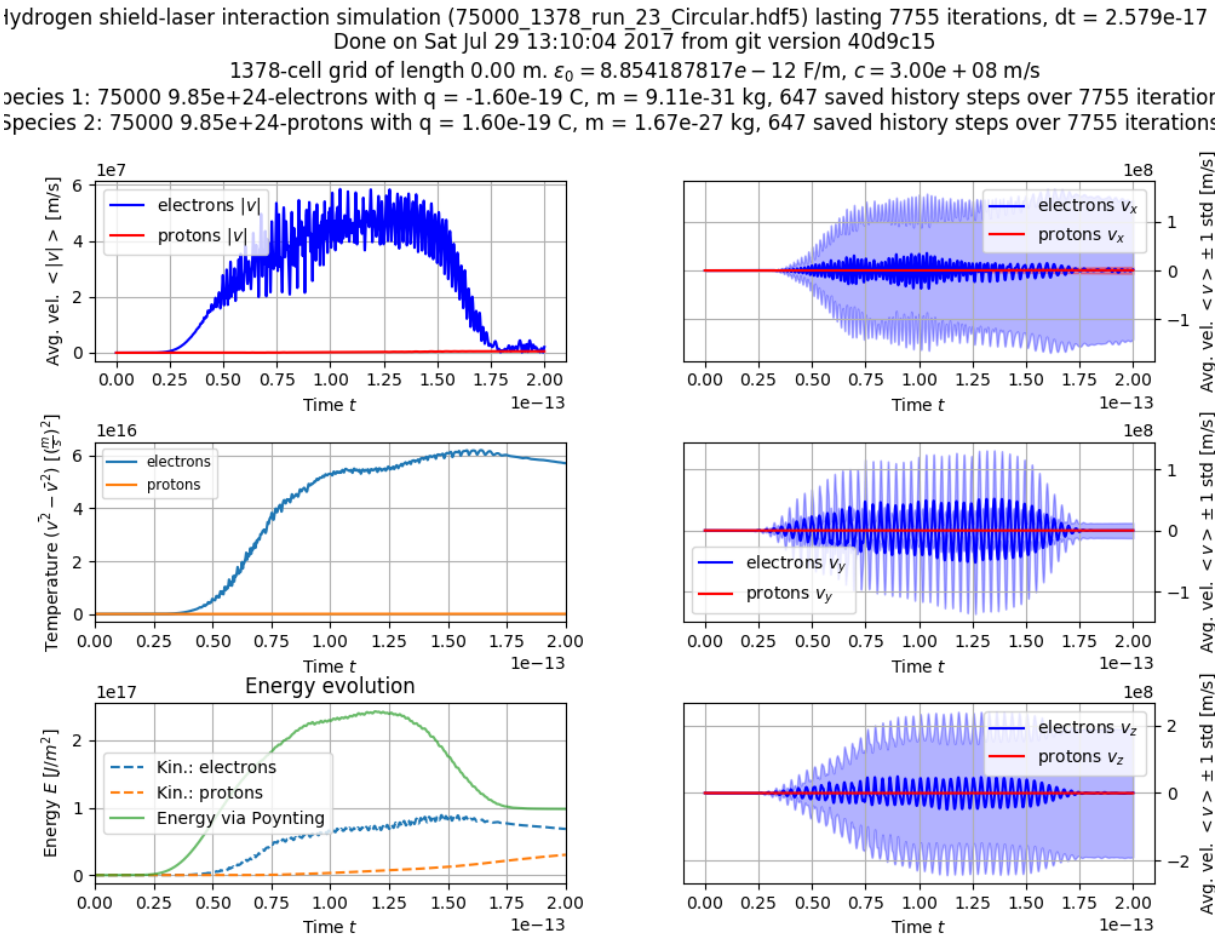
Rysunek 13: Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja kołowa. Rzut na iterację 4700/7755.



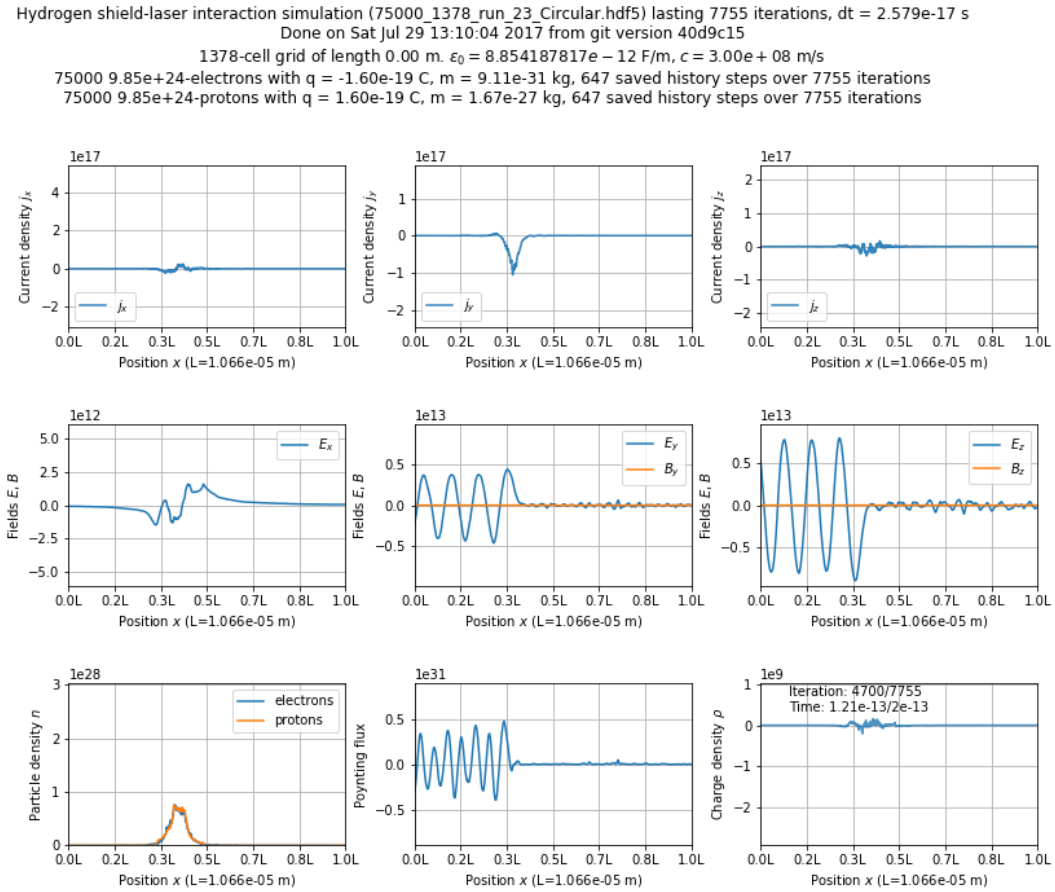
Rysunek 14: Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja liniowa.



Rysunek 15: Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja liniowa. Rzut na iterację 4700/7755.



Rysunek 16: Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja kołowa.



Rysunek 17: Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja kołowa. Rzut na iterację 4700/7755.

7 Profilowanie

7.1 Parametry uruchomienia

W celu weryfikacji i porównania możliwości *PythonPIC* na jego podstawie utworzono uproszczony, analogiczny kod w C++ ("CPIC"), również dostępny na platformie GitHub [4] i oparty o bibliotekę macierzową Eigen [31]. Porównano jego rezultaty z *PythonPIC*, osiągając dobrą zgodność.

Na potrzeby wykonania profilowania wydajności kodu przygotowano w obu wersjach programu uproszczoną wersję symulacji z laserem z rozdziału 6. Uproszczenie polega na rozmieszczeniu cząstek w jednorodnej bryle na środku symulacji. Profilowanie przeprowadzono przez 1000 iteracji programu dla zmiennej liczby cząstek i ustalonej liczby 1000 komórek Eulera, w przypadku polaryzacji liniowej i mocy lasera $10^{21} W/m^2$. Wartości fizycznych zmiennych wykorzystane do przeprowadzenia profilowania są dostępne w repozytorium CPIC.

Profilowanie przeprowadzono na komputerze o procesorze Intel Core 4 Quad 6600 3.0GHz i 4GB RAM, wykorzystując następujące wersje oprogramowania i bibliotek obliczeniowych:

- Python 3.6.2
- Numpy 1.13.3
- Numba 0.34.0
- SciPy 0.19.1
- gcc 7.2.0
- Eigen 3.3.4

Dla *PythonPIC* przeprowadzono testy w czystym Pythonie (opartym na wysokopoziomowym zastosowaniu Numpy) i w wersji próbującej optymalizować najintensywniejsze fragmenty obliczeń (relatywistyczny integrator Borysa oraz algorytm depozycji ładunku) poprzez kompilację JIT z wykorzystaniem Numba. Należy zauważyć, że ze względu na wykorzystany wysokopoziomy paradygmat obliczeń nie udało się przekompilować kodu z wykorzystaniem wydajniejszej opcji `nopython` i pozostano przy kompilacji "domyślnej" w tzw. trybie obiektowym.

Dla CPIC testy przeprowadzono w trzech wariacjach, bez flag optymalizacyjnych oraz z flagami `-O`, `-O2`. Pominięto niektóre wyniki symulacji z powodu bliżej niezidentyfikowanych błędów kończących symulację w niepokojąco krótkim czasie. Błędów tych nie udało się zlokalizować, ale pozostałe symulacje zwracają wyniki zgodne z oczekiwaniami.

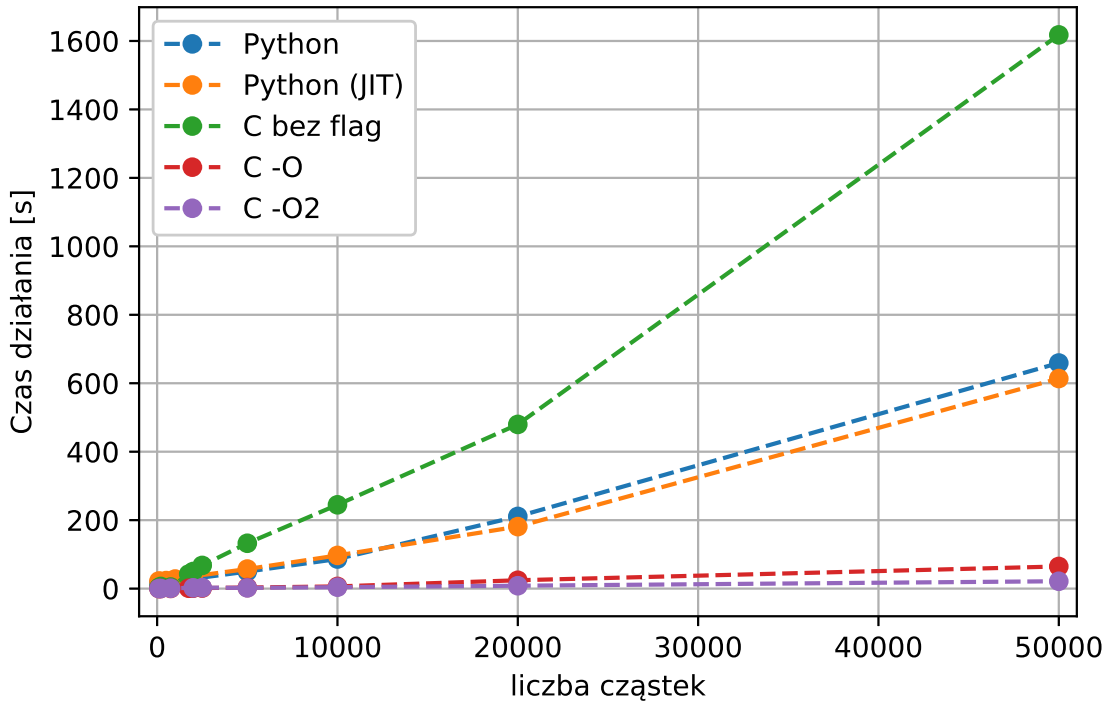
We wszystkich przypadkach pominięto zapis danych symulacyjnych do pliku oraz inicjalizację warunków początkowych, mierząc wydajność samych obliczeń.

[4] https://github.com/StanczakDominik/CPIC

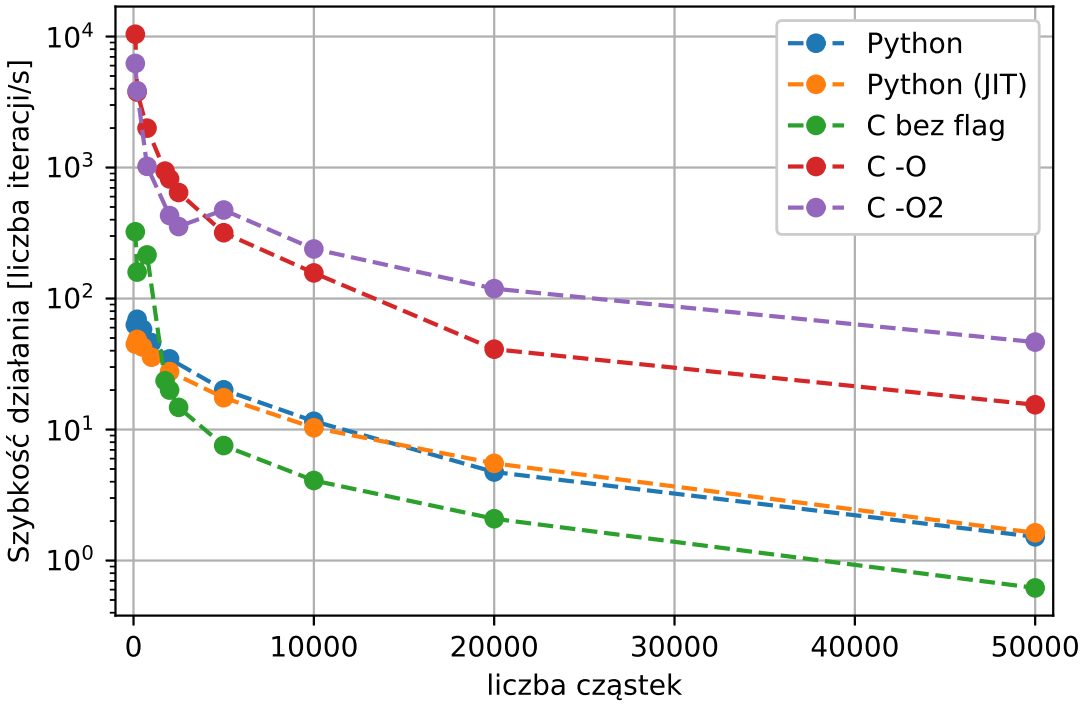
7.2 Wyniki

liczba cząstek	Python	Python (JIT)	C bez flag	C -O	C -O2
100	15.89	22.27	3.09	0.10	0.16
200	14.39	20.51	6.28	0.27	0.26
500	17.17	23.44	–	–	–
750	–	–	4.65	0.50	0.98
1000	21.71	28.04	–	–	–
1750	–	–	42.46	1.06	–
2000	28.87	36.10	49.98	1.22	2.33
2500	–	–	67.72	1.55	2.82
5000	49.72	57.16	132.50	3.14	2.11
10000	86.44	96.94	244.85	6.37	4.18
20000	210.88	181.14	479.70	24.35	8.40
50000	659.10	613.81	1617.79	64.69	21.51

Tabela 1: Czas działania symulacji, w sekundach.



Rysunek 18: Czas działania symulacji.



Rysunek 19: Szybkość działania symulacji

8 Wnioski

W niniejszej pracy opisano proces tworzenia kodu symulacyjnego implementującego algorytm particle-in-cell, którego sens i kontekst w szerszej fizyce plazmy tłumaczy rozdział 1.

W rozdziale 2 wyjaśniono zasadność modelowania plazmy symulacjami komputerowymi oraz zasadność przyjętego przybliżenia modelowania plazmy dyskretnymi cząstkami. Poszczególne elementy realizacji algorytmu particle-in-cell w bieżącym kodzie wyjaśniono w rozdziale 3.

W rozdziale 4 opisano ekosystem Pythona, jego potencjał dla nauki i symulacji numerycznej, a także strukturę i hierarchię samego kodu, który jest przedmiotem bieżącej pracy.

Z dobrą zgodnością z zakładanym modelem i istniejącymi programami symulacyjnymi udało się wykonać symulację zachowania plazmy pobudzonej wysokoenergetycznym impulsem laserowym, jak pokazuje rozdział 6.

Przeprowadzone w rozdziale 7 benchmarki pokazują, że kod będący przedmiotem bieżącej pracy jest o około rząd wielkości wolniejszy niż jego najbliższy możliwy odpowiednik napisany w C++, jeżeli kompilacja przeprowadzana jest z użyciem najprostszej flagi optymalizacyjnej. Użycie flagi `-O2` skutkuje uzyskaniem spowoduje uzyskanie dalszych postępów.

Potencjalnym problemem w pracy jest fakt, że nie cała funkcjonalność wysokopoziomego Pythona opartego u Numpy była możliwa do bezpośredniego przełożenia "jeden na jeden" na algorytm w C++ z powodu braków w bibliotece Eigen względem Numpy. W związku z tym niektóre z operacji w C++ są wykonywane poprzez prostsze pętle po cząstkach, które lepiej mogą zostać zoptymalizowane przez kompilator `gcc`. Istnieje możliwość, że do poprawy wydajności programu konieczna jest reimplementacja najbardziej złożonych częsci algorytmu w Pythonie (relatywistycznego integratora Borysa oraz depozycji prądu) w C++ bądź w czystym, prostym Pythonie z kompilacją JIT poprzez bibliotekę Numba (faktycznie, takie rozwiązanie zdaje się skutkować dobrą wydajnością w kodzie [14]).

Innym rozwiązaniem byłoby ręczne zrównoleglenie obliczeń w programie przy użyciu mocy obliczeniowej kart graficznych. Potencjalnym kandydatem do tego celu byłoby wykorzystanie popularnej biblioteki `PyCUDA`. Alternatywnym sposobem zrównoleglenia kodu byłoby wykorzystanie paradygmatu OpenMP/MPI, do czego może posłużyć biblioteka `MPI4PY`.

Program w obecnej postaci działa w jednym wymiarze, w reżimie relatywistycznym i jako taki może służyć do prostego modelowania oddziaływania plazmy z wiązkami laserowymi bądź do modelowania niestabilności w symulacjach elektrostatycznych.

Oczywistym kierunkiem rozwoju dla kodu jest dodanie obsługi ruchu cząstek w wielu wymiarach. Wymagałoby to niestety znacznej zmiany modelu rozwiązywania równań ewolucji czasowej pola elektromagnetycznego. Warunki początkowe można zaadaptować z pola elektrostatycznego, aczkolwiek gdy układ straci symetrię $\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial z} = 0$, będzie konieczne również rozwiązywanie prawa Gaussa dla magnetyzmu 6.

Symulacja nie uwzględnia również kolizji. Możliwe jest dodanie ich na przykład poprzez sprzężenie algorytmu z implementacją DSMC (`Direct Simulation Monte Carlo`) [32].

W bieżącej symulacji użyto prostego modelu pojedynczo zjonizowanych atomów wodoru bez

możliwości syntezy w neutralne cząstki wodoru. Istnieje możliwość wybrania atomów innych pierwiastków, lecz w chwili obecnej kod zupełnie nie uwzględnia możliwości dalszej jonizacji tych cząstek.

Literatura

[1] C.K. Birdsall and A.B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Series in Plasma Physics and Fluid Dynamics. Taylor & Francis, 2004. 13, 22, 28, 30, 31, 45

[2] L Villard, P Angelino, A Bottino, S Brunner, S Jolliet, B F McMillan, T M Tran, and T Vernay. Global gyrokinetic ion temperature gradient turbulence simulations of iter. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 55(7):074017, 2013. 13

[3] F. Wilson, T. Neukirch, M. Hesse, M. G. Harrison, and C. R. Stark. Particle-in-cell simulations of collisionless magnetic reconnection with a non-uniform guide field. *Physics of Plasmas*, 23(3):032302, 2016. 13

[4] Yoshinori Takao, Hiroyuki Koizumi, Kimiya Komurasaki, Koji Eriguchi, and Kouichi Ono. Three-dimensional particle-in-cell simulation of a miniature plasma source for a microwave discharge ion thruster. *Plasma Sources Science and Technology*, 23(6):064004, 2014. 13

[5] T D Arber, K Bennett, C S Brady, A Lawrence-Douglas, M G Ramsay, N J Sircombe, P Gillies, R G Evans, H Schmitz, A R Bell, and C P Ridgers. Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modelling. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 57(11):113001, 2015. 13

[6] M. Bussmann, H. Burau, T. E. Cowan, A. Debus, A. Huebl, G. Juckeland, T. Kluge, W. E. Nagel, R. Pausch, F. Schmitt, U. Schramm, J. Schuchart, and R. Widera. Radiative signatures of the relativistic Kelvin-Helmholtz instability. In *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, SC '13, pages 5:1–5:12, New York, NY, USA, 2013. ACM. 13

[7] European scientific articles will be free by 2020. http://ponderwall.com/index.php/2016/07/14/european-scientific-articles-free-by-2020/. Dostęp: 2017-11-29. 13

[8] Fernando Pérez and Brian E. Granger. IPython: a system for interactive scientific computing. *Computing in Science and Engineering*, 9(3):21–29, May 2007. 14

[9] Thomas Kluyver, Benjamin Ragan-Kelley, Fernando Pérez, Brian Granger, Matthias Bussonnier, Jonathan Frederic, Kyle Kelley, Jessica Hamrick, Jason Grout, Sylvain Corlay, et al. Jupyter notebooks—a publishing format for reproducible computational workflows. In *Positioning and Power in Academic Publishing: Players, Agents and Agendas: Proceedings of the 20th International Conference on Electronic Publishing*, page 87. IOS Press, 2016. 14, 41

[10] The Astropy Collaboration, Robitaille, Thomas P., Tollerud, Erik J., Greenfield, Perry, Droettboom, Michael, Bray, Erik, Aldcroft, Tom, Davis, Matt, Ginsburg, Adam, Price-Whelan, Adrian M., Kerzendorf, Wolfgang E., Conley, Alexander, Crighton, Neil, Barbary, Kyle, Muna, Demitri, Ferguson, Henry, Grollier, Frédéric, Parikh, Madhura M., Nair, Prasanth H., Günther, Hans M., Deil, Christoph, Woillez, Julien, Conseil, Simon, Kramer, Roban, Turner, James

E. H., Singer, Leo, Fox, Ryan, Weaver, Benjamin A., Zabalza, Victor, Edwards, Zachary I., Azalee Bostroem, K., Burke, D. J., Casey, Andrew R., Crawford, Steven M., Dencheva, Nadia, Ely, Justin, Jenness, Tim, Labrie, Kathleen, Lim, Pey Lian, Pierfederici, Francesco, Pontzen, Andrew, Ptak, Andy, Refsdal, Brian, Servillat, Mathieu, and Streicher, Ole. Astropy: A community python package for astronomy. *A&A*, 558:A33, 2013. 14

[11] F.D. Witherden, A.M. Farrington, and P.E. Vincent. PyFR: An open source framework for solving advection–diffusion type problems on streaming architectures using the flux reconstruction approach. *Computer Physics Communications*, 185(11):3028 – 3040, 2014. 14

[12] Freddie Witherden, Michael Klemm, and Peter Vincent. PyFR - EuroSciPy 2015. 14

[13] P. M. Bellan. *Fundamentals of Plasma Physics*. Cambridge University Press, July 2008. 15

[14] Rémi Lehe, Manuel Kirchen, Igor A. Andriyash, Brendan B. Godfrey, and Jean-Luc Vay. A spectral, quasi-cylindrical and dispersion-free particle-in-cell algorithm. *Computer Physics Communications*, 203:66 – 82, 2016. 18, 38, 59

[15] F.F. Chen. *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. Number v. 1 in Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion. Springer, 1984. 20

[16] S. Jabłoński, J. Badziak, and P. Rączka. Generation of high-energy ion bunches via laser-induced cavity pressure acceleration at ultra-high laser intensities. *Laser and Particle Beams*, 32(1):129–135, 2014. 20

[17] Sławomir Jabłoński. Two-dimensional relativistic particle-in-cell code for simulation of laser-driven ion acceleration in various acceleration schemes. *Physica Scripta*, 2014(T161):014022, 2014. 20

[18] M.E.J. Newman. *Computational Physics*. Createspace Independent Pub, 2012. 21

[19] J. Villasenor and O. Buneman. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers. *Computer Physics Communications*, 69:306–316, March 1992. 23, 25, 28, 29

[20] Remi Lehe. Electromagnetic particle-in-cell codes. https://people.nscl.msu.edu/~lund/uspas/scs_2016/lec_adv/A1a_EM_PIC.pdf, 2017. [Online; dostęp 2017-08-24]. 29

[21] Sławomir Jabłoński. Zagadnienia dotyczące realizacji pracy inżynierskiej pana Dominika Stańczaka. nieopublikowane. 30, 42

[22] S. van der Walt, S. C. Colbert, and G. Varoquaux. The numpy array: A structure for efficient numerical computation. *Computing in Science Engineering*, 13(2):22–30, March 2011. 37

[23] Ilan Schnell. MKL optimizations for Anaconda. https://www.continuum.io/blog/developer-blog/anaconda-25-release-now-mkl-optimizations. Dostęp: 2017-08-13. 37

[24] Eric Jones, Travis Oliphant, Pearu Peterson, et al. SciPy: Open source scientific tools for Python. http://www.scipy.org/, 2001–. [Online; dostęp 2017-08-13]. 37

[25] Siu Kwan Lam, Antoine Pitrou, and Stanley Seibert. Numba: A LLVM-based Python JIT compiler. In *Proceedings of the Second Workshop on the LLVM Compiler Infrastructure in HPC*, LLVM '15, pages 7:1–7:6, New York, NY, USA, 2015. ACM. 37

[26] Andrew Collette. *Python and HDF5*. O'Reilly, 2013. 38

[27] J. D. Hunter. Matplotlib: A 2d graphics environment. *Computing in Science Engineering*, 9(3):90–95, May 2007. 38

[28] pytest. https://docs.pytest.org/en/latest/. Dostęp: 2017-08-13. 38

[29] Travis CI. https://travis-ci.org/. Dostęp: 2017-08-13. 39

[30] Matt Davis. Snakeviz. https://github.com/jiffyclub/snakeviz/, 2016. 40

[31] Gaël Guennebaud, Benoît Jacob, et al. Eigen v3. http://eigen.tuxfamily.org, 2010. 56

[32] Lubos Brieda. Direct simulation monte carlo (dmsc) method. https://www.particleincell.com/2012/dsmc0/. [Online; dostęp 2017-08-17]. 59

SPIS RYSUNKÓW

Spis rysunków

1 Typowe funkcje kształtu dla makrocząstki . . . 19
2 Energia w symulacji elektrostatycznej. Ze względu na brak pola magnetycznego w tej symulacji używany jest efektywnie iterator typu leapfrog. . . . 21
3 Ilustracja depozycji ładunku poprzez skalowanie pola (`area weighting`). Do komórki 0 przypisana zostanie część ładunku proporcjonalna do niebieskiej części pola trójkąta, zaś do 1 - reszta. . . . 24
4 Ilustracja ruchu cząstki poruszającej się z maksymalną prędkością dozwoloną w symulacji. . . . 26
5 Zaimplementowane w symulacji kształty preplazmy. . . . 31
6 Wizualizacja szybkości działania poszczególnych fragmentów kodu wygenerowana programem `snakeviz`. . . . 40
7 Oscylacje zimnej plazmy w reżimie liniowym. Cząstki wykonują prawie harmoniczne oscylacje wokół swoich położeń równowagi, zaś energia w układzie jest wymieniana między energią kinetyczną cząstek a energią pola elektrostatycznego. Jako wyjście programu, wykresy z *PythonPIC* w bieżącym rozdziale zamieszczane są w języku angielskim. . . . 44
8 Stabilny reżim dla układu dwóch strumieni. Widoczne są jedynie cykliczny ruch jednostajny w obszarze symulacji i niewielkie zmiany prędkości cząstki. Moduł prędkości strumienia 1 dokładnie śledzi moduł prędkości strumienia 2, więc nie jest widoczny na wykresie w lewym górnym rogu. . . . 46
9 Niestabilny reżim dla układu dwóch strumieni. Trajektoria cząstki staje się chaotyczna. 47
10 Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja liniowa. . . . 48
11 Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja liniowa. Rzut na iterację 4700/7755. . . . 49
12 Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja kołowa. . . . 50
13 Intensywność wiązki laserowej $10^{21} J/m^2$, polaryzacja kołowa. Rzut na iterację 4700/7755. . . . 51
14 Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja liniowa. . . . 52
15 Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja liniowa. Rzut na iterację 4700/7755. . . . 53
16 Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja kołowa. . . . 54
17 Intensywność wiązki laserowej $10^{23} J/m^2$, polaryzacja kołowa. Rzut na iterację 4700/7755. . . . 55
18 Czas działania symulacji. . . . 57
19 Szybkość działania symulacji . . . 58

Spis tablic

1 Czas działania symulacji, w sekundach. 57