

Politechnika Warszawska

W Y D Z I A Ł F I Z Y K I



Praca dyplomowa inżynierska

na kierunku Fizyka Techniczna
w specjalności Fizyka komputerowa

Zoptymalizowana symulacja Particle in Cell w języku Python

Dominik Stańczak

261604

promotor
dr Sławomir Jabłoński

WARSZAWA 2017

Streszczenie

Tytuł pracy: Zoptymalizowana symulacja Particle in Cell w języku Python

1 Streszczenie

Utworzono kod symulacyjny Particle-in-Cell mający modelować interakcję relatywistycznej plazmy wodorowej oraz impulsu laserowego. Kod zoptymalizowano w celu zademonstrowania możliwości użycia wysokopoziomowego języka programowania wywołującego niskopoziomowe procedury numeryczne do osiągnięcia wysokiej wydajności obliczeniowej. *Słowa kluczowe:*

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

(podpis opiekuna naukowego)

(podpis dyplomanta)

Abstract

Title of the thesis: Optimised Particle in Cell simulation in Python

2 Abstract

A 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 to demonstrate the possibilities of using a high level programming language to call low level numerical procedures, thus achieving high computational efficiency. *Słowa kluczowe:*

<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.:

Zoptymalizowana symulacja 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.:

Zoptymalizowana symulacja 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	Plazma - czwarty stan materii	15
2.2	Modelowanie i symulacja plazmy	16
2.3	Modele Particle-in-cell	17
2.3.1	Pętla obliczeniowa PIC	17
2.3.2	Makrocząstki	18
2.4	Problem testowy	19
2.5	Python	19
3	Implementacja	21
3.1	Całkowanie równań ruchu	21
3.2	Depozycja gęstości prądu	22
3.2.1	Depozycja ładunku	22
3.3	Interpolacja pól elektrycznego i magnetycznego	23
3.4	Depozycja prądu	23
3.4.1	Depozycja podłużna	24
3.4.2	Depozycja poprzeczna	25
3.5	Ewolucja czasowa pola elektromagnetycznego	25
3.6	Warunki początkowe dla cząstek	27
3.7	Opis i treść kodu	28
3.8	Wykorzystane biblioteki i technologie	28
3.8.1	Numpy	28
3.8.2	scipy	28
3.8.3	Numba	29
3.8.4	HDF5	29
3.8.5	matplotlib	29
3.8.6	py.test	29
3.8.7	Travis CI	30
3.8.8	snakeviz	30
3.9	Struktura i hierarchia kodu	31
3.9.1	Grid	31
3.9.2	Species	31
3.9.3	Simulation	32
3.9.4	Pliki pomocnicze	33
4	Weryfikacja	34

4.1	Przypadki testowe	34
4.1.1	Testy algorytmiczne	34
4.1.2	Testy symulacyjne	35
4.1.3	oscylacje zimnej plazmy	35
4.1.4	niestabilność dwóch strumieni	35
4.2	Symulacja oddziaływania lasera z tarczą wodorową	36
4.3	Benchmarki - szybkość, zasobożerność	36
4.4	Problemy napotkane w trakcie pisania kodu	36
5	Zakończenie	37

1 Wstęp

Algorytmy Particle-in-Cell (cząstka w komórce) to jedno z najbardziej zbliżonych do fundamentalnej fizyki metod symulacji materii w stanie plazmy. Zastosowany w nich lagranżowski opis cząsteczek pozwala na dokładne odwzorowanie dynamiki 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 programu.

W ostatnich czasach symulacje Particle-in-Cell zostały wykorzystane między innymi do symulacji przewidywanej turbulencji plazmy w reaktorze termojądrowym ITER

TODO: źródło, grupa Hammeta

modelowania rekonekcji linii magnetycznych w polu gwiazdy

TODO: źródło

projektowania silników jonowych (Halla)

TODO: źródło

badania interakcji laserów z plazmą w kontekście tworzenia niewielkich, wysokowydajnych akceleratorów cząstek

TODO: źródło

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

TODO: źródło PIConGPU

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).

To sprawia, że pisanie złożonych programów symulacyjnych, zwłaszcza przez osoby zajmujące się głównie pracą badawczą (na przykład fizyką), a nie tylko programowaniem, jest znacznie utrudnione. Należy też zauważyć, że programy takie często są trudne, jeżeli nie niemożliwe do weryfikacji działania, ponownego wykorzystania i modyfikacji przez osoby niezwiązane z oryginalnym autorem z powodów takich jak

- brak dostępności kodu źródłowego
- niedostateczna dokumentacja
- brak jasno postawionych testów pokazujących, kiedy algorytm działa zgodnie z zamiarami twórców
- zależność działania kodu od wersji zastosowanych bibliotek, sprzętu i kompilatorów

1. WSTĘP

Niniejsza praca ma na celu utworzenie kodu 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 osiągnięcia maksymalnej wydajności i sprawności obliczeniowej. Może to też oczywiście pozwolić na dalsze zastosowanie kodu w celach badawczych i jego dalszy rozwój, potencjalnie z użyciem kart graficznych. Ostatecznie, jest to również test wydajnościowy możliwości Pythona w symulacjach

Zamiast ostatecznie chciałbym dać coś typu last but not least

numerycznych.

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

2 Część analityczno-teoretyczna

coś tutaj może?

2.1 Plazma - czwarty stan materii

Plazma, powszechnie nazywana czwartym stanem materii, to zbiór zjonizowanych cząstek oraz elektronów przejawiających jako grupa globalną obojętność elektryczną. Innymi słowy, od gazu plazmy 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 międzygwiazdnej 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.

Globalny wzrost zainteresowania fizyką plazmy na arenie geopolitycznej rozpoczął się w latach '50 ubiegłego wieku, gdy uświadomiono sobie, że można zastosować ją do przeprowadzania kontrolowanych reakcji syntezy jądrowej,

TODO: reference: fusion in europe history of fusion

które mogą mieć zastosowania w energetyce jako następny etap rozwoju po reakcjach rozpadu wykorzystywanych w "klasycznych" 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.

TODO reference fusion for energy history of fusion

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 (światłówki)

Należy też zwrócić uwagę, że ze względu na złożoność układów plazmowych pra-komputerowa fizyka miała ogromne problemy z merytorycznymi badaniami zachowania plazmy poza wybranymi,

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

mocno uproszczonymi reżimami. Postęp w badaniach plazmy, jak sugeruje rozwój technologii kontrolowanej syntezy jądowej, jest silnie skorelowany

ref youtube wykład

z rozwojem mocy obliczeniowej oraz algorytmów symulacyjnych.

2.2 Modelowanie i symulacja plazmy

Modelowanie zjawisk z zakresu fizyki plazmy jest jednym z bardziej złożonych problemów fizyki komputerowej. Głównym, koncepcyjnie, 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 $\approx r^{-2}$.

Z powodu dużej liczby cząstek w układach plazmowych, jedynymi podejściami fundamentalnymi (jako opierającymi się na fundamentalnej fizyce) są opisy kinetyczne. Wielkością opisującą plazmę jest tu 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). Ewolucja czasowa funkcji rozkładu dokonuje się poprzez rozwiązanie wariantu równania Boltzmanna zwanego równaniem Vlasova,

Własowa?

które sprzęga gęstości ładunku i prądu otrzymywane z funkcji dystrybucji z równaniami Maxwella na ewolucję pola elektromagnetycznego. Równanie Vlasova może zostać rozszerzone do równania Fokkera-Plancka uwzględniającego bezpośrednie kolizje międzycząsteczkowe.

$$\frac{d}{dt} f_\alpha(\vec{x}, \vec{v}, t) - \nabla f - \nabla_{\vec{v}}(\vec{v} \times \vec{B} + \vec{E}) = f_{coll} \quad (1)$$

wzór na równanie Vlasova

W praktyce równanie Vlasova jest trudne do rozwiązania 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. Jako równanie różniczkowe cząstkowe, równanie Vlasova jest rozwiązywane na dyskretnych siatkach, należy zauważyć zaś, należy zauważyć, 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. Jest to więc często niepraktyczne obliczeniowo, między innymi ze względu na istotne w plazmach fuzyjnych zjawisko "uciekających elektronów" o relatywistycznych prędkościach.

W modelowaniu komputerowym plazmy stosuje się trzy główne koncepcyjne podejścia:

1. modele kinetyczne rozwiązujące bezpośrednio równania typu Vlasova na dyskretnych siatkach

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

2. modele płynowe oparte na ciągłym opisie plazmy poprzez uśrednienie po dystrybucji wielkości termodynamicznych, co daje modele takie jak magnetohydrodynamikę. Jest to wciąż układ równań różniczkowych cząstkowych, lecz na mniej wymiarowej siatce. Niestety, nie nadają się one do badań plazmy daleko od równowagi z powodu czynionych przy nich założeń takich jak maxwellowski rozkład prędkości.
3. modele dyskretne oparte na samplowaniu dystrybucji plazmy przy użyciu dyskretnych cząstek, pozwalające w prosty sposób uzyskać dobre przybliżenie faktycznego ruchu cząstek w plazmie i prądów generowanych tym ruchem.

Prawdopodobnie najpopularniejszym modelem z tej drugiej kategorii są modele Particle-in-cell.

2.3 Modele Particle-in-cell

Idea modelu particle-in-cell (*PIC*) jest wyjątkowo prosta i opiera się na idei przyspieszenia najbardziej złożonego obliczeniowo kroku symulacji dynamiki molekularnej, czyli obliczania sił międzycząsteczkowych. Cząstki poruszają się w ciągłej, Lagrange'owskiej przestrzeni. Ich ruch wykorzystywany jest do zebrania informacji dotyczącej gęstości ładunku i prądu na dyskretną, Eulerowską siatkę. 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 $n \log n$ z n^2

wyrazić złożoność PIC przez rozmiar siatki

2.3.1 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 tej siatce 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 (prawo Gaussa dla pola elektrycznego)

$$\rho/\epsilon_0 = \nabla \cdot \vec{E} = \nabla \cdot \vec{B} \quad (2)$$

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

rozwiązywane iteracyjnie (metody takie jak Gaussa-Seidela lub gradientów sprzężonych)

ref

lub spektralnie, przy użyciu transformat Fouriera bądź Hankela.

ref

Metody lokalne z kolei wykorzystują równania rotacyjne (prawa Ampera-Maxwella oraz Faradaya)

$$\nabla \times \vec{E} = -\partial \vec{B} / \partial t \quad \nabla \times \vec{B} = \mu_0 (\vec{J} + \epsilon_0 \partial \vec{E} / \partial t) \quad (3)$$

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 algorytmu sprawia, że algorytmy Particle-in-cell doskonale nadają się do zrównoleglenia (problem jest w bardzo dobrym przybliżeniu "trywialnie paralelizowalny"). Z tego powodu algorytmy Particle-in-cell nadają się doskonale do wykorzystania rosnącej mocy kart graficznych i architektur GPGPU.

- Porusz (Push)

iteracja równań ruchu cząstek

$$d\vec{p}/dt = \vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (4)$$

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.

refka

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

2.3.2 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 szczęśliwym 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

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

występujących w naturze (jak jony i elektrony, pozwalając jednocześnie zachować gęstości cząstek i ładunku zbliżone do rzeczywistych.

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

zweryfikować

$$n_c = m_e \varepsilon_0 * \left(\frac{2\pi c}{e\lambda} \right)^2 \quad (5)$$

gdzie m_e to masa spoczynkowa elektronu, ε_0 to przenikalność elektryczna próżni,

przenikalność?

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.

To jest generalnie moja własna analiza i nie jestem jej w 100% pewien, ale tak 80% to dałbym.

2.4 Problem testowy

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.

Układ ten jest silnie zbliżony do rzeczywistych eksperymentów prowadzonych w Instytucie Fizyki Plazmy i Laserowej Mikrosyntezy.

Tu bym chciał prosić o weryfikację.

2.5 Python

Python jest wysokopoziomowym, interpretowanym językiem programowania, którego atutami są szybkie prototypowanie, bogaty zestaw bibliotek numerycznych

dopisać zalety

Python znajduje zastosowania w analizie danych, uczeniu maszynowym (zwłaszcza w astronomii). 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 ostatnio kodzie PyFR,

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

refka i opis PyFR

Atutem Pythona w wysokowydajnych obliczeniach jest łatwość wywoływania 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 bez faktycznej pracy z tymi językami.

Ostatnimi czasy popularną staje się również kompilacja Just-in-time wysokopoziomowego kodu Pythona do kodu niskopoziomowego przy pierwszym uruchomieniu programu

numba

Istniejącym od niedawna kodem implementującym tą metodę jest FBPIC

refka

3 Implementacja

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.

reference

Niestety, w bieżącym kodzie nie można go zastosować ze względu na jego niesymplektyczność: mimo ogromnej dokładności jest on niestabilny pod względem energii cząstek.

reference

W symulacjach typu Particle-in-cell konieczne jest zastosowanie innych algorytmów. Dobrym algorytmem symplektycznym jest na przykład powszechnie znany *leapfrog*, polegający na przesunięciu prędkości o połowę iteracji czasowej względem położenia.

reference

Mimo tego, że energie cząstek w ruchu obliczonym tym integratorem nie są lokalnie stałe na krótkich skalach czasowych, to jednak zachowują energię na skali globalnej.

IMAGE: chyba miałem to na coldplasma

W przypadku ruchu w polu magnetycznym nie wystarczy, niestety, użyć zwykłego algorytmu *leapfrog*.

READ

Używa się tutaj specjalnej adaptacji tego algorytmu na potrzeby ruchu w zmiennym polu elektromagnetycznym, tak zwanego integratora Borysa,

REFERENCE

który rozбивa pole elektryczne na dwa impulsy, między którymi następują dwie rotacje polem magnetycznym. Algorytm jest dzięki temu symplektyczny i długofalowo zachowuje energię cząstek.

$$\vec{v}^- = \vec{v}^{n-1/2} + \frac{qdt}{2m} \vec{E}^n \vec{t} = \frac{qdt}{2m} \vec{B}^n \vec{v}' = \vec{v}^- + \vec{v}^- \times \vec{t} \vec{s} = \vec{t} / (1 + t^2) \vec{v}^+ = \vec{v}^- + \vec{v}' \times \vec{s} \vec{v}^{n+1/2} = \vec{v}^+ + \frac{qdt}{2m} \vec{E}^n \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \vec{v}^{n+1/2} \quad (6)$$

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:

$$\vec{u} = \vec{v} \gamma \gamma = \sqrt{1 + (u/c)^2} = 1 / \sqrt{1 - (v/2)^2} \quad (7)$$

3. IMPLEMENTACJA

3.2 Depozycja gęstości prądu

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 $n + 1/2$

CHECK

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 trakcie symulacji. Ewolucja pola następuje poprzez znajomość gęstości prądu. Jeżeli zaś pole elektromagnetyczne spełniało warunek

prawa Gaussa

na początku, depozycja prądu w sposób zachowujący ładunek zapewni dalsze zachowanie tego warunku w kolejnych iteracjach.

Wyjątek stanowi początek symulacji, w której pole faktycznie musi zostać obliczone od podstaw na podstawie gęstości ładunku. PythonPIC pozwala poradzić sobie z tym problemem. Pierwszą opcją jest ustawienie początkowych położeń ładunków na identyczne między cząstkami ujemnymi 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 konieczny. 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

sprawdzić dokładnie ile, rzędu 4%

%) czasu trwania symulacji).

3.2.1 Depozycja ładunku

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

$$x' = (x/dx) - i_x \quad (8)$$

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

mam wrażenie że jako że tego nie wykorzystuję w symulacji to to może być nieco błędne, środki komórek Eulera wg depozycji ładunku są w połowie. Niemniej jednak, elektrostatyczne symulacje okresowe zdają się działać w ten sposób, nawet gdy liczę ewolucję pól poprzez prądy. To wymaga dalszej weryfikacji.

RYSUNEK depozycja ładunku

Po obliczeniu otrzymana tablica gęstości *makrocząstek* cząstek 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.

3.3 Interpolacja pól elektrycznego i magnetycznego

Interpolacja pól elektrycznego i magnetycznego odbywa się na bardzo podobnej zasadzie, co depozycja ładunku. Wartości pól są liniowo skalowane do pozycji makrocząstek według ich względnych położzeń (równanie 8) wewnątrz komórek.

$$F = F_i * (1 - x') + F_{i+1} * x' \quad (9)$$

3.4 Depozycja prądu

Depozycja prądu jest bardziej złożonym zagadnieniem niż depozycja ładunku. Prądy wymagają bowiem informacji o prędkości cząstek w połówkowych iteracjach $v^{n+1/2}$, ale sama interpolacja do komórek siatki wymaga położenia w iteracji całkowitej x^n . Poza tym jest też kwestia, że zwykle 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.

jak sformalizować warunek zachowania ładunku

depozycja ładunku w mojej obecnej wersji nie jestem wcale przekonany że zachowuje ładunek

To zaś dyskwalifikuje prostą liniową interpolację jako metodę depozycji prądu, ponieważ chcemy rozwiązywać lokalne równania Ampere'a-Maxwella

nazwisko

zamiast liczyć globalne równania Poissona i Gaussa. Jeżeli chcemy uniknąć obliczania poprawek korygujących dywergencję pól, musimy to okupić większą złożonością algorytmu depozycji prądu.

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 skalowanego *przekrycia* cząstek z komórkami, przez które przechodzą w trakcie ruchu.

Jako że cząstki mają szerokość równą szerokości komórki Δx , ich prędkość jest ograniczona przez prędkość światła, zaś za krok czasowy przyjmujemy $\Delta t = \Delta x/c$, można łatwo zauważyć, że

3. IMPLEMENTACJA

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 przejechałaby

spelling

przez łącznie trzy komórki.

zweryfikować z algorytmem

Algorytm rozбивa 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 $t = \Delta t$.

3.4.1 Depozycja podłużna

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

$$t_l = (x - x_g)/v \quad (10)$$

Granica obszaru 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

$$j_x = qnv_x t / \Delta t \quad (11)$$

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 (w pętli wewnętrznej, niezależnie od jej faktycznego ruchu w symulacji)

właściwie możnaby zoptymalizować w ten sposób ruch cząstek, wyciąć $x+ = v_x \Delta t$

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 $t' = t - t_l$.

Do której komórki trafia ładunek w każdej iteracji?

3. IMPLEMENTACJA

W każdej iteracji pętli obliczeniowej prąd ze wszystkich cząstek jest akumulowany do tablicy prądów. Tablica ma rozmiar $NG + 2$

verify

3.4.2 Depozycja poprzeczna

Algorytm jest identyczny do depozycji podłużnej poza samym etapem depozycji prądu.

depozycja poprzeczna

CONTINUE opowiadanie o interpolacji

3.5 Ewolucja czasowa pola elektromagnetycznego

przerobić

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

refka Buneman

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), 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:

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

* 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)

jak to faktycznie wygląda z tym algo?

co zapobiega problemowi informacji przebiegającej w symulacji szybciej niż światło oraz zapewnia stabilność na podstawie warunku Couranta.

gładsze przejście tutaj - wyprowadzenie field solvera

W 1D można dokonać dekompozycji składowych poprzecznych pola elektromagnetycznego (tutaj oznaczanych y, z) na propagujące się w przód (+) i w tył (−) obszaru symulacji. Składowe E_y, B_z są zebrane poprzez zamianę zmiennych w dwie wielkości elektrodynamiczne F^+, F^- .

3. IMPLEMENTACJA

Wychodzimy z rotacyjnych równań Maxwella:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \nabla \times \vec{B} = \mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (12)$$

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

słowo - decouple

:

$$(\nabla \times \vec{B})_x = 0 = \mu_0(j_x + \epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t}) \quad (13)$$

Z kolei dla pola poprzecznego, sumując:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \nabla \times \vec{B} = \mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \nabla \times (\vec{E} + \vec{B}) = -\frac{\partial (\vec{B} + \mu_0 \epsilon_0 \vec{E})}{\partial t} + \mu_0 \vec{j} c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \nabla \times (\vec{E} + \vec{B}) = -\frac{\partial (\vec{B} + \mu_0 \epsilon_0 \vec{E})}{\partial t} + \mu_0 \vec{j} \quad (14)$$

skończyć wyprowadzenie

Po dodaniu i odjęciu stronami:

$$\nabla \times (\vec{E} + c\vec{B}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + c\mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \nabla \times (\vec{E} - c\vec{B}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - c\mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (15)$$

$$F^+ = E_y + cB_z F^- = E_y - cB_z \quad (16)$$

Analogicznie, dla składowych E_z, B_y :

zweryfikować znaki i czy c nie jest w mianowniku

$$G^+ = E_z + cB_y G^- = E_z - cB_y \quad (17)$$

Wyrazem "źródłowym" dla F, G jest prąd poprzeczny. Po dyskretyzacji równania, wyrażenie na ewolucję pól F, G między iteracjami przybiera postać:

$$F_{i+1}^{+n+1} = F_n^+ + j \quad (18)$$

sprawdzić

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.

3. IMPLEMENTACJA

Inaczej koniecznym staje się aplikowanie tak zwanej poprawki Borysa,

źródło - prezentacja

aby upewnić się, że warunek z równań Maxwella $\nabla \rho / \varepsilon_0 = \nabla \cdot \vec{E}$ jest wciąż spełniony. Składowa podłużna pola jest obliczana poprzez wyrażenie

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{j_x}{\varepsilon_0} \quad (19)$$

czy raczej jej dyskretny odpowiednik

$$E_i^{n+1} = E_i^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon_0} j_{x,i}^{n+1/2} \quad (20)$$

3.6 Warunki początkowe dla cząstek

W celu dobrania warunków początkowych wykorzystuje się algorytm opisany w

Birdsall Langdon

Jego działanie można łatwo zilustrować na przykładzie początkowej funkcji gęstości cząstek zadanej dowolną funkcją analityczną.

czy analityczna nie jest słowem zarezerwowanych dla tych na szeregi

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

rysunek: przykład z ipynb

Zaimplementowany algorytm jest w stanie przyjąć dowolną funkcję analityczną

czy nie przesadzam?

i zrenormalizować ją tak, aby $\int_0^L f(x) dx = N$. W praktyce wykorzystuje się wartości marginalnie większe niż N , mianowicie $N+0.1$, co pozwala na uniknięcie problemów ze skończoną dokładnością obliczeń na liczbach zmiennoprzecinkowych.

Aby uniknąć problemu w przypadku dwóch Species cząstek o identycznej liczbie makrocząstek i przeciwnym znaku które według powyższego algorytmu zostałyby rozłożone w identycznych miejscach z powodu niezależnego stosowania algorytmu dla każdej grupy cząstek, co prowadziłoby do neutralizacji ładunku na całej symulacji, na położenia cząstek nakłada się dodatkowy gaussowski szum o niewielkiej intensywności.

Analogiczny algorytm znajduje zastosowanie w obliczaniu początkowych wartości prędkości dla cząstek. Wykorzystuje się relatywistyczny rozkład Maxwella

$$f(p) = \frac{N}{2\pi} \frac{mc^2}{T} \frac{1}{1 + T/mc^2} \exp\left(\frac{-mc^2}{T}(\gamma - 1)\right) \gamma = \sqrt{1 + p^2} \quad (21)$$

3. IMPLEMENTACJA

Należy wspomnieć, że aby cząstki były prawidłowo ztermalizowane

czy to jest słowo

należy zadbać o zdekorelowanie ich prędkości między sobą. Naiwne zastosowanie algorytmu na położenia prowadzi zaś do rozłożenia cząstek rosnąco numeracją w kierunku rosnącego położenia x .

Rozwiązaniem tego problemu jest losowa zamiana prędkości między losowo wybranymi cząstkami.

dopisać jak będzie zrobione.

3.7 Opis i treść kodu

Cały kod programu w celu reprodukowalności wyników tworzony był i jest dostępny na platformie Github

link

3.8 Wykorzystane biblioteki i technologie

3.8.1 Numpy

numpy 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.

REFERENCE źródło na powolność pętli

Pod zewnętrzną powłoką zawiera odwołania do znanych, wypróbowanych i sprawdzonych w numeryce 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 Numpy są automatycznie zrównoleglane

refka intel MKL

tam, gdzie pozwala na to niezależność obliczeń.

Numpy jest oprogramowaniem otwartym, udostępnianym na licencji BSD.

refka

3.8.2 scipy

Kolejną podstawową biblioteką w numerycznym Pythonie jest scipy, biblioteka zawierająca wydajne implementacje wielu podstawowych algorytmów numerycznych służących między innymi całkowaniu, optymalizacji, algebrze liniowej czy transformatom Fouriera. W naszym przypadku stosujemy zawarte w tej bibliotece funkcje całkujące do określenia początkowego profilu gęstości

plazmy.

czy stosuję scipy gdzieś jeszcze

3.8.3 Numba

numba to biblioteka służąca do kompilacji just-in-time kodu.

Przerobić wyjaśnienie działania Numba

W wielu przypadkach pozwala na osiągnięcie kodem napisanym w czystym Pythonie wydajności marginalnie niższej bądź nawet równej do analogicznego programu w C bądź Fortranie.

refka

Jednocześnie należy zaznaczyć prostotę jej użycia:

fragment kodu. @jit przed kodem

3.8.4 HDF5

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

reference h5py

Używa się go na przykład w

lista miejsc gdzie używają hdf5

<https://github.com/PPPLDeepLearning/plasma-python>

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

3.8.5 matplotlib

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

Matplotlib również jest oprogramowaniem otwartym, udostępnianym na licencji

matplotlib license, reference

3.8.6 py.test

Przy pracy nad kodem użyto frameworku testowego py.test

3. IMPLEMENTACJA

referencje

Obsługa testów jest trywialna:

przykład testu z programu

Należy zaznaczyć, że w numeryce, gdzie błędne działanie programu nie objawia się zazwyczaj błędem wykonywania programu, 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 numeryczno-symulacyjny powinien je wykorzystywać, najlepiej do weryfikacji każdej części algorytmu z osobna.

Dobrym przykładem skutecznego testu jednostkowego jest porównanie wyników z fragmentu algorytmu (na przykład depozycji ładunku, który to test zawarty jest w pliku `pythonpic/tests/test_current_deposition.py`

sprawdzić urla

z wynikami z poprzedniego, zweryfikowanego programu, bądź z obliczeniem ręcznym.

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

sprawdzić licencję

3.8.7 Travis CI

Nieocenionym narzędziem w pracy nad kodem był system ciągłej integracji (*continuous integration*) Travis CI

refka

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 uruchamianiu lżejszych, acz wciąż zasobożernych

to słowo

symulacji testowych i testów algorytmicznych.

3.8.8 snakeviz

W optymalizacji przydatny okazał się program `snakeviz` dostępny na licencji opensource 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.

refka

grafika snakeviz

3.9 Struktura i hierarchia kodu

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:

3.9.1 Grid

Klasa reprezentująca dyskretną siatkę Eulera, na której dokonywane są obliczenia dotyczące pól elektromagnetycznych oraz gęstości ładunku i prądu. Zawiera:

- 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.
- $E_{i,j}$ - tablicę pola elektrycznego na siatce.
- $B_{i,j}$ - tablicę pola 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*, funkcję czasu określającą wartość warunku brzegowego dotyczącego natężenia fali elektromagnetycznej (laserowej) wchodzącej do pola symulacji z lewej strony.

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

- `apply_bc` - aktualizuje krańcowe wartości tablic E, B w oparciu o podany warunek brzegowy.
- `gather_current`

finish these

- `gather_charge`
- `solve`
- `field_solve`
- `electric_field_function`, `magnetic`
- `save_to_h5py`

3.9.2 Species

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,

3. IMPLEMENTACJA

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 $q \cdot \text{scaling}$, masa $m \cdot \text{scaling}$.
- `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 $n, n+1, n+2 \dots$
- trójwymiarowych prędkości makrocząstek $\vec{v}^{n+\frac{1}{2}}$, zapisywanych w iteracjach $n+\frac{1}{2}, n+\frac{3}{2}, n+\frac{5}{2} \dots$
- stanu makrocząstek (flagi boolowskie 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 informacjom diagnostycznym o przestrzennej gęstości cząstek.
- trzy tablice rozmiaru (N_T) dotyczącą średnich prędkości, średnich kwadratów prędkości i odchyłeń standardowych prędkości.

Jeżeli liczba makrocząstek lub iteracji przekracza pewną stałą, 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 metodach klasy `Species`:

- `push`

fill these

3.9.3 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

3. IMPLEMENTACJA

- `Grid` - obiekt siatki
- `list_species` - lista grup makrocząstek w symulacji

metody `simulation`

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_init`, która przygotowuje warunki początkowe. Domyślna wersja tej metody wykonuje pierwszą, początkową iterację równań ruchu, która pozwala na zachowanie symplektyczności integratora równań ruchu,

stylizacja?

co pomaga zachować energię cząstek w 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.

3.9.4 Pliki pomocnicze

Poza powyższymi program jest podzielony na pliki:

aktualizacja

- `algorithms_grid` - zawiera algorytmy dotyczące rozwiązywania równań Maxwella na dyskretnej siatce
- `algorithms_interpolation` - zawiera algorytmy interpolujące pola z cząstek na siatkę i odwrotnie
- `algorithms_pusher` - zawiera algorytmy integrujące numerycznie równania ruchu cząstek
- `animation` - tworzy animacje dla celów analizy danych
- `static_plots` - tworzy statyczne wykresy dla celów analizy danych
- `plotting` - zawiera ustawienia dotyczące analizy danych

czy to można przenieść do `simulation` czy gdzieś?

Przygotowane konfiguracje istniejących symulacji są zawarte w plikach `configs/run_*`:

przeformułować

- `run_coldplasma`
- `run_twostream`
- `run_wave`
- `run_beam`
- `run_laser`

Algorytmiczne testy jednostkowe są zawarte w katalogu `tests`.

4. WERYFIKACJA

4 Część weryfikacyjna

Niniejsza analiza przeprowadzona została na “finalnej” w chwili pisania niniejszej pracy wersji programu. W repozytorium Git na Githubie jest to commit “placeholder”

uzupełnić commita

identyfikowany również jako wersja 1.0.

4.1 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`

`pytest reference`.

i w większości były uruchamiane na platformie TravisCI.

4.1.1 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.

sprawdzić listę testów

- Gather
 - (a) Depozycja prądu z pojedynczej cząstki na niewielką siatkę
 - (b) Depozycja prądu z dwóch pojedynczych cząstek na niewielką siatkę i porównanie z sumą prądów dla obu pojedynczych cząstek
 - (c) Depozycja prądu z dużej ilości równomiernie rozłożonych cząstek
- Solve
 - (a) Symulacja fali sinusoidalnej, obwiedni impulsu i złożenia tych dwóch propagujących się w próżni
- Scatter
 - (a) ...
- Push

write these

- Ruch w jednorodnym polu elektrycznym wzdłuż osi układu
- Ruch w jednorodnym polu magnetycznym z polem magnetycznym

4.1.2 Testy symulacyjne

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

Zastosowano kod do symulacji kilku znanych problemów w fizyce plazmy:

4.1.3 oscylacje zimnej plazmy

Jest to efektywnie fala stojąca. Jednorodne rozmieszczenie cząstek z zerową prędkością początkową (stąd określenie zimna plazma"jako nietermalna)

czy ja ruszam prędkości czy położenia i czy to nie powinno zmienić fazy

jednego typu na okresowej siatce z jednoczesnym wysunięciem ich z położenia równowagi o $\Delta x = A \sin(kx)$, gdzie $k = n2\pi/L$, pozwala na obserwację oscylacji cząstek wokół ich stabilnych położenia równowagi. W przestrzeni fazowej x, V_x cząstki zataczają efektywnie elipsy, co pozwala wnioskować że ruch ten jest harmoniczny.

Jest to, oczywiście, spełnione jedynie dla niewielkich odchylen; dla $A \rightarrow dx$

dx

obserwuje się nieliniowy reżim

i co

Jest to też łoże testowe

sformułowanie

dla innych przypadków, takich jak efekt Kaiser-Wilhelm

sformułowanie z BL

oraz

czegoś jeszcze.

4.1.4 niestabilność dwóch strumieni

przeformułować

Różnice między tym a poprzednim przypadkiem to obecność dwóch jednorodnie rozłożonych strumieni cząstek z przeciwnie skierowanymi prędkościami wzdłuż osi układu.

Dla niewielkich prędkości

sparametryzować

obserwuje się liniowy reżim

bunchingu

4. WERYFIKACJA

Dla dużych prędkości

sprawdzić

obserwuje się nieliniowe zachowanie cząstek, które zaczynają się mieszać ze sobą, zaś cały układ się termalizuje.

opisać dalej

4.2 Symulacja oddziaływania lasera z tarczą wodorową

Jako warunki początkowe przyjęto plazmę z liniowo narastającą funkcją rozkładu gęstości (jest to tak zwany obszar prejonizacji)

preplazmy?

Gęstość rozkładu plazmy przyjęto jako

Początkowe prędkości cząstek przyjęto jako zerowe.

wylosowano z relatywistycznego rozkładu Maxwella w kierunkach y, z

Za moc lasera przyjęto 10^{23} W/m^2 ,

ASK: czy to nie jest za dużo?

zaś za jego długość fali $1.064 \mu\text{m}$ (jest to laser Nd:YAG)

Długość obszaru symulacji to

wstawić

Prędkość światła c , stałą dielektryczną ϵ_0 , ładunek elementarny e , masy protonu i elektronu m_p, m_e przyjęto według tablic, jak obrazuje następująca tabela:

zrobić tabelkę na stałe

4.3 Benchmarki - szybkość, zasobożerność

fix

Do przeprowadzenia testów wydajności kodu użyto

cProfile

4.4 Problemy napotkane w trakcie pisania kodu

5 Zakończenie

Utworzono kod symulacyjny implementacyjny algorytm particle-in-cell w Pythonie przy użyciu wszystkich dostępnych możliwości, jakie daje ekosystem open-source. Kod zoptymalizowano przy użyciu Otrzymane wyniki benchmarków pozwalają sądzić, że

dokończyć