

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	Modelowanie i symulacja plazmy	16
2.2	Modele Particle-in-cell	17
2.2.1	Pętla obliczeniowa PIC	17
2.2.2	Makrocząstki	18
2.3	Problem testowy	20
2.4	Python	20
2.4.1	Numpy	20
2.4.2	scipy	21
2.4.3	Numba	21
2.4.4	HDF5	21
2.4.5	matplotlib	21
2.4.6	py.test	22
2.4.7	Travis CI	22
2.4.8	snakeviz	22
3	Opis algorytmów PIC	24
3.1	Całkowanie równań ruchu	24
3.2	Depozycja gęstości prądu	25
3.2.1	Depozycja ładunku	26
3.3	Interpolacja pól elektrycznego i magnetycznego	26
3.4	Depozycja prądu	27
3.4.1	Depozycja podłużna	27
3.4.2	Depozycja poprzeczna	28
3.5	Ewolucja czasowa pola elektromagnetycznego	29
3.5.1	Solver globalny - elektrostatyczny	29
3.5.2	Solver lokalny	29
3.6	Warunki początkowe dla cząstek	31
3.6.1	Warunki brzegowe	32
4	Opis i treść kodu PythonPIC	32
4.1	Grid - siatka Eulera	32
4.2	Species - cząstki	33
4.3	Simulation	34
4.4	Pliki pomocnicze	35
5	Weryfikacja	36

5.1	Przypadki testowe	36
5.1.1	Testy algorytmiczne	36
5.2	Testy symulacyjne - przypadki elektrostatyczne	37
5.2.1	oscylacje zimnej plazmy	37
5.2.2	niestabilność dwóch strumieni	37
5.2.3	Propagacja fali	38
5.2.4	Oddziaływanie strumienia plazmy z gęstą plazmą tła	38
5.3	Symulacja elektromagnetyczna - oddziaływanie z tarczą wodorową	38
5.4	Profilowanie	38
5.4.1	cProfile	39
5.4.2	line_profiler	39
5.4.3	IPython timeit	39
5.5	Problemy napotkane w trakcie pisania kodu	39
6	Zakończenie	40
	Literatura	41

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 [11]
- modelowania rekonekcji linii magnetycznych w polu gwiazdy [12]
- projektowania silników jonowych (Halla) [13]
- badania interakcji laserów z plazmą w kontekście tworzenia niewielkich, wysokowydajnych akceleratorów cząstek [14]

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 [7].

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 oryginalnym 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 kodu od wersji zastosowanych bibliotek, sprzętu i kompilatorów

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

Jest to też znacząca przeszkoda dla adaptacji w nauce modelu open science zakładanego przez organizacje unijne do przyjęcia jeszcze w bieżącym dziesięcioleciu, do roku 2020.

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

1. WSTĘP

sprawności obliczeniowej.

Może to też oczywiście pozwolić na dalsze zastosowanie kodu w celach badawczych i jego dalszy rozwój, potencjalnie z użyciem kart graficznych, lub w innych projektach, zwłaszcza open source.

Jest to również test wydajnościowy możliwości Pythona w intensywnych symulacjach numerycznych, które do tej pory były często domeną konwencjonalnie zarezerwowaną dla języków niskopoziomowych.

Tu przydałoby się przynajmniej do dwóch pełnych stron pod objętość

2 Część analityczno-teoretyczna

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 międzygwiazdowej 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 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 "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. 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 (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, mocno uproszczonymi reżimami. Postęp w badaniach plazmy, jak sugeruje rozwój technologii kontrolowanej syntezy jądrowej, jest silnie skorelowany z rozwojem mocy obliczeniowej oraz algorytmów symulacyjnych.[15]

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

2.1 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 $\approx r^{-2}$. 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, 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, które sprzęga gęstości ładunku i prądu otrzymywane z funkcji dystrybucji z równaniami Maxwella na ewolucję pola elektromagnetycznego.

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

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

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

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

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \rho / \epsilon_0 \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (6)$$

Równanie Vlasova może zostać rozszerzone do równania Fokkera-Plancka uwzględniającego bezpośrednie kolizje międzycząsteczkowe.

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, 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.

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

W modelowaniu komputerowym plazmy stosuje się trzy główne koncepcyjne podejścia:

1. modele kinetyczne rozwiązujące bezpośrednio równania typu Vlasova na dyskretnych siatkach
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. Znajdują za to szerokie zastosowanie w astronomii.
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. Pozwalają na wizualizację efektów działań pól, ale potrafią być mało wydajne do modelowania efektów kolektywnych.

czy na pewno należy rozróżniać kinetyczne i dyskretne?

Istnieje bardzo popularna klasa modeli łączących cechy kategorii pierwszej i trzeciej. 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 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 położenia cząstek. Obliczeniowo, uwzględniając koszty odpowiednich interpolacji, pozwala to zredukować złożoność kroku obliczenia sił międzycząsteczkowych do złożoności $O(n)$ z $O(n^2)$. Oczywiście, jest to okupione zależnością złożoności od liczby punktów na siatce m , lecz jako że $m \ll n$, 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 położenia 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

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

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)⁵⁶ rozwiązywane iteracyjnie (metodami takimi jak Gaussa-Seidela lub gradientów sprzężonych) lub spektralnie, przy użyciu transformat Fouriera lub Hankela [6]. Metody lokalne z kolei wykorzystują równania rotacyjne (prawa Ampera-Maxwella⁴ oraz Faradaya³):

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

$$d\vec{p}/dt = \vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (7)$$

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.

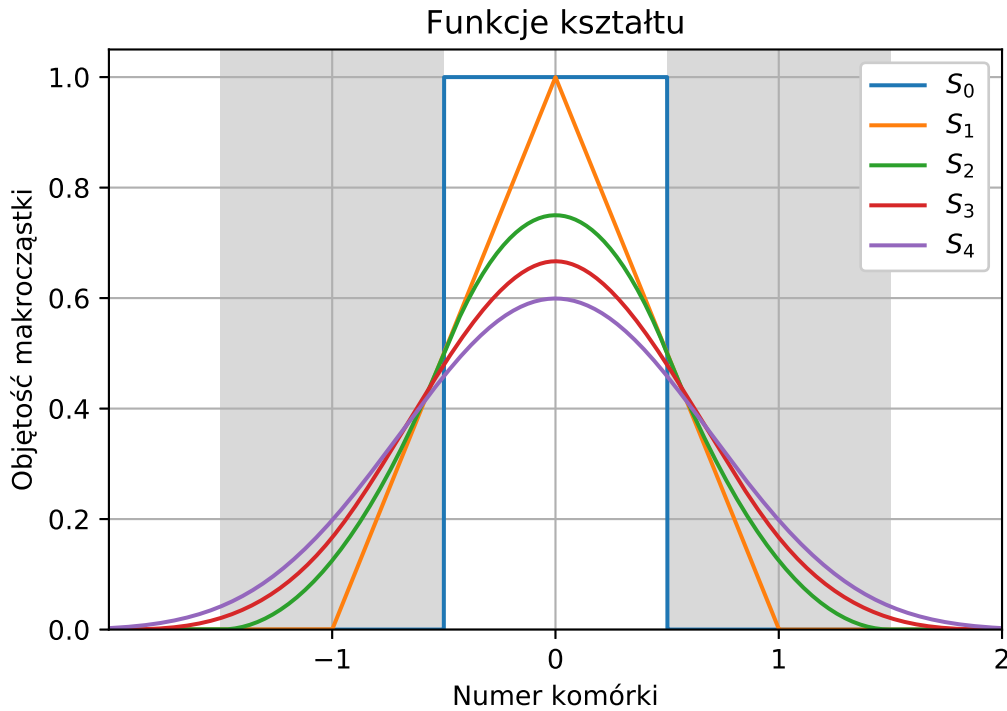
2.2.2 Makrocząstki

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 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 występujących w naturze (jak jony i elektrony, pozwalając jednocześnie zachować gęstości cząstek

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

i ładunku zbliżone do rzeczywistych.

Makrocząstki posiadają też kształt, który wyraża się w symulacji poprzez interpolację wielkości fizycznych znanych na siatce Eulera do położenia cząstek i odwrotnie. Matematycznie jest to opisane poprzez funkcję kształtu. Najprostsza jednowymiarową funkcją kształtu jest funkcja “cylindrowa”, która oznacza po prostu, że cząstka znajduje się w całości w jednej komórce naraz. Inne funkcje kształtu tworzy się poprzez kolejne sploty funkcji podstawowej, co obrazuje rysunek??.



Rysunek 1: Typowe funkcje kształtu dla makrocząstki

W symulacjach elektromagnetycznych zazwyczaj (“tradycyjnie”) stosuje się gęstości cząstek (rzeczywistych) rzędu jednej dziesiątej bądź setnej gęstości krytycznej plazmy n_c (wyrażaną wzorem 8), która oznacza taką koncentrację elektronów, przy której fala laserowa zaczyna być tłumiona zamiast być przepuszczaną przez plazmę.[4]

$$n_c = m_e \varepsilon_0 * \left(\frac{2\pi c}{e\lambda} \right)^2 \quad (8)$$

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. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

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 doboru kierunku polaryzacji promieniowania laserowego w symulacji.

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

Tu bym chciał prosić o weryfikację.

2.4 Python

Python jest wysokopoziomowym, interpretowanym językiem programowania, którego atutami są

- otwartość i dostępność
- szybkie prototypowanie dzięki wbudowanemu środowisku REPL, rozszerzalnemu przez pakiet IPython[?]
- możliwość łatwej integracji z innymi, niskopoziomowymi językami, między innymi C.
- łatwy dostęp do szerokiej gamy darmowych bibliotek na licencji open source, w tym naukowych i numerycznych
- wieloplatformowość, łatwość uruchomienia tych samych programów na wielu różnych maszynach

Python znajduje szerokie zastosowania w analizie danych i uczeniu maszynowym (zwłaszcza w astronomii[16]). 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. [22][?]

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 bez faktycznej pracy z tymi językami.

2.4.1 Numpy

numpy[20] 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

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

słabym punktem Pythona.

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 wersji `numpy` zawartej w dystrybucji Anaconda są automatycznie zrównoleglane tam, gdzie pozwala na to niezależność obliczeń dzięki dołączonym bibliotekom Intel Math Kernel Library.[17]

`Numpy` jest oprogramowaniem otwartym, udostępnianym na licencji BSD.

2.4.2 `scipy`

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

2.4.3 `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. [9]

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

fragment kodu. `@jit` przed kodem

Istniejącym od niedawna kodem implementującym tą metodę jest FBPIC[6].

2.4.4 `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`. [5]

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

2.4.5 `matplotlib`

Do wizualizacji danych z symulacji (oraz tworzenia schematów w sekcji teoretycznej niniejszej pracy) użyto własnoręcznie napisanych skryptów w uniwersalnej bibliotece graficznej `matplotlib`[8]. `matplotlib` zapewnia wsparcie zarówno dla grafik statycznych w różnych układach współrzędnych (w tym 3D), jak również dla dynamicznie generowanych animacji przedstawiających

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

przebiegi czasowe symulacji.

2.4.6 py.test

Przy pracy nad kodem użyto frameworku testowego `py.test` [1]. Tworzenie testów jest trywialne:

Listing 1: Podstawowy przykład testu w pliku `func.py`

```
def f(x):  
    return 3*x  
  
def test_f():  
    assert f(4) == 12
```

Uruchamianie zaś:

```
pytest func.py
```

Należy zaznaczyć, że w numeryce, 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 numeryczno-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.

2.4.7 Travis CI

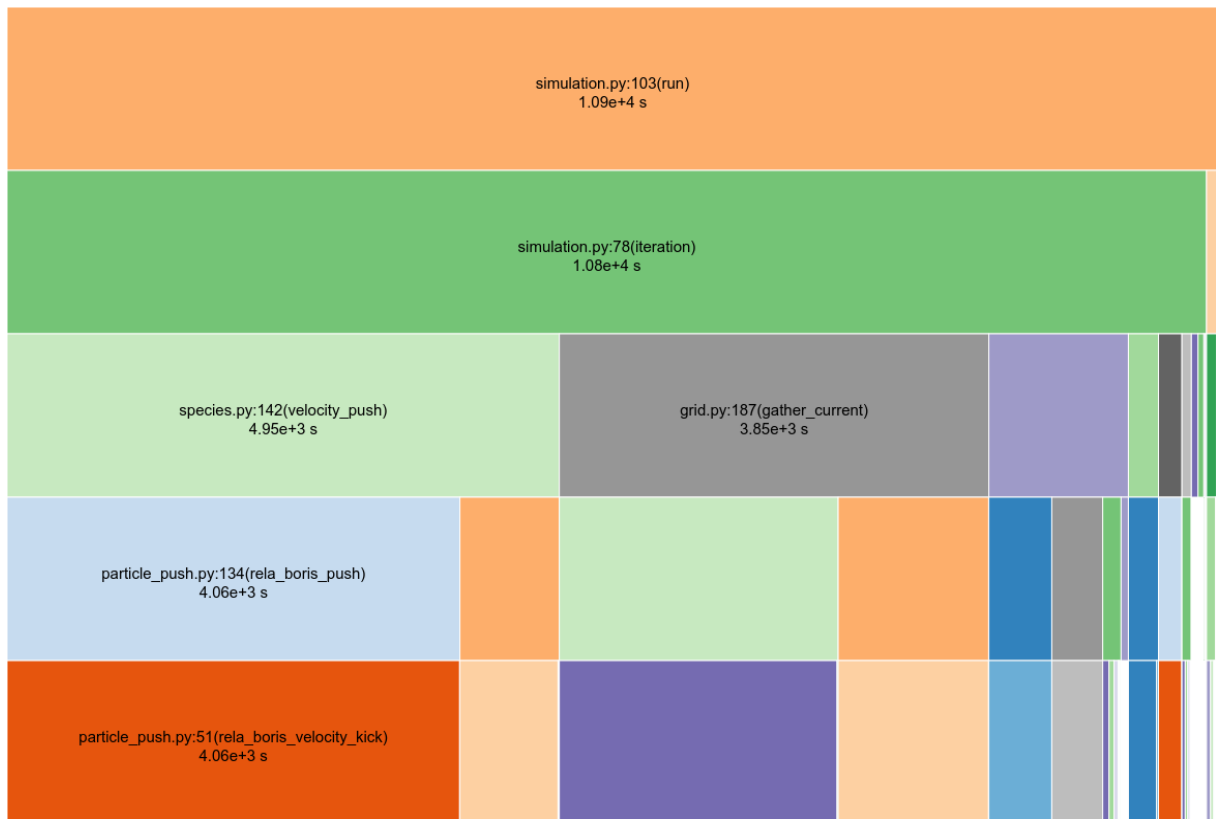
Nieocenionym narzędziem w pracy nad kodem był system ciągłej integracji (*continuous integration*) Travis CI [2] dostępny za darmo dla projektów open-source. Travis pobiera aktualne wersje kodu przy każdej aktualizacji wersji dostępnej na serwerze GitHub i uruchamia testy, zwracając komunikat o ewentualnym 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.

2.4.8 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.

2. CZĘŚĆ ANALITYCZNO-TEORETYCZNA

Działanie programu ilustruje rysunek 2.



Rysunek 2: Wizualizacja szybkości działania poszczególnych fragmentów kodu wygenerowana programem snakeviz.

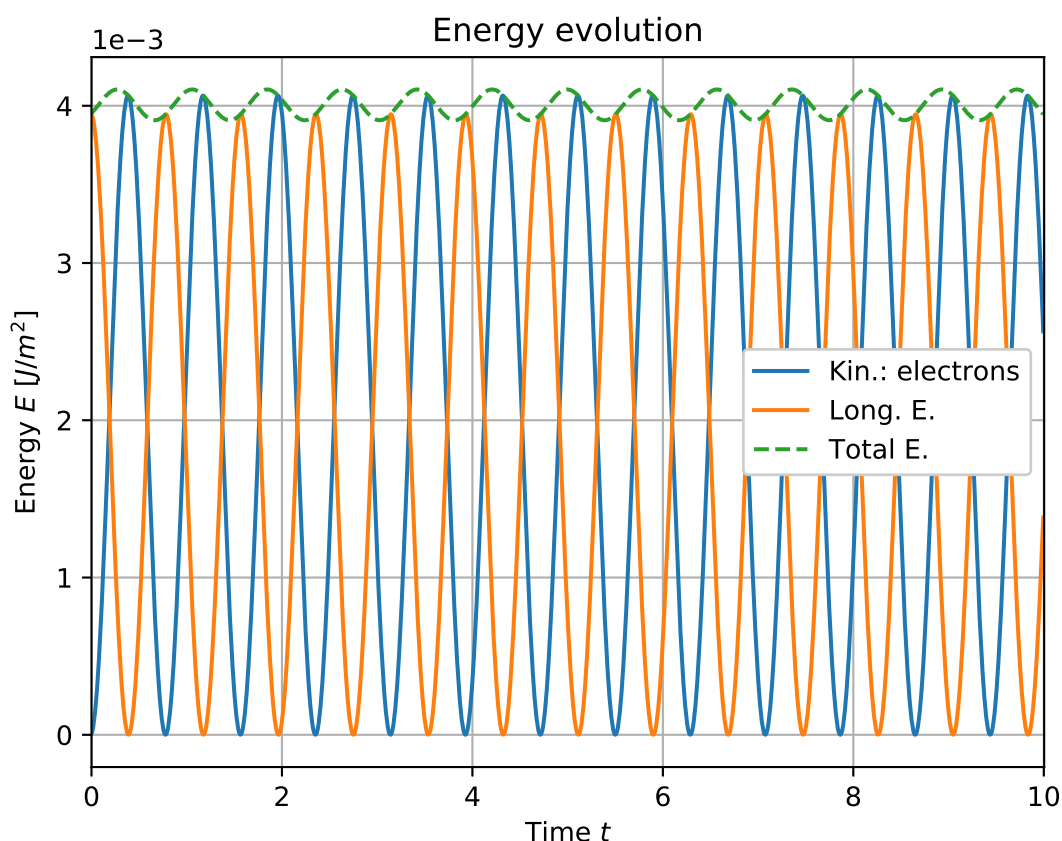
3. OPIS ALGORYTMÓW PIC

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 jego niesymplektyczność: mimo ogromnej dokładności jest on niestabilny pod względem energii cząstek[18]. 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.[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.



Rysunek 3: Energia w symulacji elektrostatycznej. Ze względu na brak pola magnetycznego w tej symulacji używany jest tak naprawdę iterator typu leapfrog.

3. OPIS ALGORYTMÓW PIC

W przypadku ruchu w polu magnetycznym nie wystarczy, niestety, użyć zwykłego algorytmu *leapfrog*. Używa się tutaj specjalnej adaptacji tego algorytmu na potrzeby ruchu w zmiennym polu elektromagnetycznym, tak zwanego integratora Borysa[19], który rozбивa pole elektryczne na dwa impulsy, między którymi następują dwie rotacje polem magnetycznym. Algorytm jest dzięki temu symplektyczny i długofalowo zachowuje energię cząstek.

$$\begin{aligned}
 \vec{v}^- &= \vec{v}^{n-1/2} + \frac{qdt}{2m} \vec{E}^n \\
 \vec{t} &= \frac{qdt}{2m} \vec{B}^n \\
 \vec{v}' &= \vec{v}^- + \vec{v}^- \times \vec{t} \\
 \vec{s} &= \vec{t} / (1 + t^2) \\
 \vec{v}^+ &= \vec{v}^- + \vec{v}' \times \vec{s} \\
 \vec{v}^{n+1/2} &= \vec{v}^+ + \frac{qdt}{2m} \vec{E}^n \\
 \vec{x}^{n+1} &= \vec{x}^n + \vec{v}^{n+1/2} dt
 \end{aligned}$$

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:

$$\vec{u} = \vec{v} \gamma \tag{9}$$

$$\gamma = \sqrt{1 + (u/c)^2} = 1 / \sqrt{1 - (v/2)^2} \tag{10}$$

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 $n + 1/2$ 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 ?? na początku, depozycja prądu w sposób zachowujący ładunek zapewni dalsze zachowanie tego warunku w kolejnych iteracjach. [21]

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

3. OPIS ALGORYTMÓW PIC

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 położenia 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

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

$$x' = (x/dx) - i_x \quad (11)$$

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* 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 położenia (równanie 11) wewnątrz komórek.

$$F = F_i * (1 - x') + F_{i+1} * x' \quad (12)$$

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 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.

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 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 przekroczenia 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 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 połowę obecnej komórki), to w czasie ruchu przejechałaby

spelling

przez łącznie trzy komórki.

zweryfikować z algorytmem

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 $t = \Delta t$.

3.4.1 Depozycja podłużna

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

$$t_l = (x - x_g)/v \quad (13)$$

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 ,

3. OPIS ALGORYTMÓW PIC

- W przeciwnym razie prąd jest depozytowany przez czas t i ruch cząstki kończy się.

Wkład cząstki do depozytowanego prądu wynosi

$$j_x = qnv_x t / \Delta t \quad (14)$$

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 można by 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?

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. 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 obliczamy jako

$$s = \quad (15)$$

przekrycie

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

$$w = (s(x^{n+1}) + s(x^n)) \quad (16)$$

Ostatecznie wkład do komórki "obecnej" w ciągu jednej iteracji pętli obliczeniowej to

3. OPIS ALGORYTMÓW PIC

zweryfikować

to $w * qnv_{y,z}t/\Delta t$. Zaś do dalszej, przekrywanej komórki jest to $(1 - w) * qnv_{y,z}t/\Delta t$.

jakoś poprawić stylistykę chyba

Tablica prądów poprzecznych, do których zostają depozytowane, 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.

3.5 Ewolucja czasowa pola elektromagnetycznego

przerobić

Ewolucja pola elektromagnetycznego opisana jest poprzez równania Maxwella. Jak pokazują Buneman i Villasenor, numerycznie można zastosować dwa główne podejścia: [21]

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

3.5.1 Solver globalny - elektrostatyczny

Za [3], wychodzimy z równania Poissona:

wyprowadzenie

3.5.2 Solver lokalny

Wychodzimy z rotacyjnych równań Maxwella:

3. OPIS ALGORYTMÓW PIC

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (17)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (18)$$

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.

$$(\nabla \times \vec{B})_x = 0 = \mu_0(j_x + \epsilon_0 \frac{\partial E_x}{\partial t}) \quad (19)$$

Z kolei dla pola poprzecznego, sumując:

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (20)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (21)$$

$$\nabla \times (\vec{E} + \vec{B}) = -\frac{\partial (\vec{B} + \mu_0 \epsilon_0 \vec{E})}{\partial t} + \mu_0 \vec{j} \quad (22)$$

$$c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \quad (23)$$

$$\nabla \times (\vec{E} + \vec{B}) = -\frac{\partial (\vec{B} + \mu_0 \epsilon_0 \vec{E})}{\partial t} + \mu_0 \vec{j} \quad (24)$$

$$(25)$$

skończyć wyprowadzenie

Po dodaniu i odjęciu stronami:

$$\nabla \times (\vec{E} + c\vec{B}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + c\mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad \nabla \times (\vec{E} - c\vec{B}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - c\mu_0(\vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) \quad (26)$$

$$F^+ = E_y + cB_z \quad F^- = E_y - cB_z \quad (27)$$

Analogicznie, dla składowych E_z, B_y :

zweryfikować znaki i czy c nie jest w mianowniku

$$G^+ = E_z + cB_y \quad G^- = E_z - cB_y \quad (28)$$

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

3. OPIS ALGORYTMÓW PIC

$$F_{i+1}^{n+1} = F_n^+ + j \quad (29)$$

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. 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

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{j_x}{\varepsilon_0} \quad (30)$$

czy raczej jej dyskretny odpowiednik

$$E_i^{n+1} = E_i^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon_0} j_{x,i}^{n+1/2} \quad (31)$$

3.6 Warunki początkowe dla cząstek

W celu dobrania warunków początkowych wykorzystuje się algorytm opisany w [3]. 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 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.

rysunek: przykład z ipynb

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 symulację 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: preplazma.eps

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

4. OPIS I TREŚĆ KODU PYTHONPIC

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

word

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 reprodukowalności wyników tworzony był i jest dostępny na platformie GitHub[10].

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:

- x_i - tablicę położenia 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*, obiekt zawierający informacje dotyczące warunku brzegowego

4. OPIS I TREŚĆ KODU PYTHONPIC

zadanego na pole elektryczne i magnetyczne. W przypadku symulacji laserowej jest to subklasa `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.
- `gather_current`

finish these

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

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 $q \cdot \text{scaling}$, 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 położenia 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 położenia i prędkości cząstek.

Dane te są wykorzystywane do tworzenia diagramów fazowych cząstek.

- odpowiadające poprzednio wymienionym tablice rozmiaru (N_T^s, N) , $(N_T^s, N, 3)$.

4. OPIS I TREŚĆ KODU PYTHONPIC

- 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 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

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

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. 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. OPIS I TREŚĆ KODU PYTHONPIC

4.4 Pliki pomocnicze

Poza powyższymi program jest podzielony na pliki z implementacjami algorytmów numerycznych, co pozwala na zwiększenie niezależności testów oraz zwiększa modularność kodu.

- BoundaryCondition
- FieldSolver
- particle_push
- field_interpolation
- 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`.

5. WERYFIKACJA

5 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.

5.1 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` i w większości były uruchamiane na platformie TravisCI.

5.1.1 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
 - Ruch w jednorodnym polu elektrycznym wzdłuż osi układu

write these

- Ruch w jednorodnym polu magnetycznym ??????????

- write these

5.2 Testy symulacyjne - przypadki elektrostatyczne

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:

5.2.1 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:

$$x = x_0 + x_1 x_0 = L * n / N x_1 = A \sin(k x_0) = A \sin(2\pi n x_0 / L) \quad (32)$$

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

Gęstość ładunku jest wyzerowana w pierwszym kroku algorytmu rozwiązywania pola elektrycznego poprzez wyzerowanie zerowej składowej fourierowskiej gęstości ładunku, co jest jednoznaczne z przyjęciem nieskończonej masywnych i nieruchomych jonów dodatnich dokładnie neutralizujących gęstość ładunku elektronów.

Sytuacja ta 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 z dobrym przybliżeniem harmoniczny. Oczywiście, nie jest to do końca oscylacja harmoniczna z powodu odchylenia pola interpolowanego z Eulerowskiej siatki od generowanego faktycznym potencjałem $\sim x^2$.

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

dx

obserwuje się nieliniowy reżim oscylacji,

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

5.2.2 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

5. WERYFIKACJA

sparametryzować

obserwuje się liniowy reżim 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

sprawdzić

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 strumieni zamienia się w energię potencjalną pola równowagowego a oraz termalną energię kinetyczną, co sprawia, że średnia prędkość obu strumieni ulega zmniejszeniu.

To oraz szybkość narastania niestabilności jest obiektem automatycznych testów sprawdzających poprawność symulacji.

5.2.3 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

5.2.4 Oddziaływanie strumienia plazmy z gęstą plazmą tła

5.3 Symulacja elektromagnetyczna - oddziaływanie z tarczą wodorową

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 i jest normalizowana do danego poziomu maksymalnej gęstości w obszarze plazmy właściwej przy zadanej liczbie makrocząstek.

Początkowe prędkości cząstek przyjęto jako zerowe.

wylosowano z relatywistycznego rozkładu Maxwella w kierunkach y, z

Za moc lasera przyjęto wielkości 10^{21} , 10^{22} , 10^{23} W/m^2 , zaś za jego długość fali $1.064 \mu\text{m}$ (jest to laser Nd:YAG). Przeprowadzono badania w polaryzacjach liniowych oraz kołowej wiązki laserowej.

Długość obszaru symulacji to około $10.6 \mu\text{m}$.

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

5.4 Profilowanie

W celu zmierzenia wydajności kodu zastosowano następujące techniki:

5.4.1 cProfile

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

1. Czyści zawartość folderu `data_analysis`
2. Uruchamia środowisko Anaconda zawierające bardziej zoptymalizowane od zwyczajnych wersje biblioteki Numpy
3. Uruchamia skrypt `fulllaser.py` w trybie `cProfile` i zapisuje dane

Następnie zapisane dane są wizualizowane programem `snakeviz`.

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

5.4.2 line_profiler

5.4.3 IPython timeit

5.5 Problemy napotkane w trakcie pisania kodu

6. ZAKOŃCZENIE

6 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

Literatura

- [1] Todo pytest. 22
- [2] Travis ci. 22
- [3] C.K. Birdsall and A.B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Series in Plasma Physics and Fluid Dynamics. Taylor & Francis, 2004. 29, 31
- [4] F.F. Chen. *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. Number v. 1 in Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion. Springer, 1984. 19
- [5] Andrew Collette. *Python and HDF5*. O'Reilly, 2013. 21
- [6] TODO (Francja). Fbpic. 18, 21
- [7] TODO (Helmholtz). Picongpu. 13
- [8] J. D. Hunter. Matplotlib: A 2d graphics environment. *Computing in Science Engineering*, 9(3):90–95, May 2007. 21
- [9] 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. 21
- [10] Dominik Stańczak. Pythonpic. 32
- [11] TODO. Todo. 13
- [12] TODO. Todo. 13
- [13] TODO. Todo. 13
- [14] TODO. Todo. 13
- [15] TODO. Todo. 15
- [16] TODO. Todo. 20
- [17] TODO. Todo. 21
- [18] TODO. Todo. 24
- [19] TODO. Todo. 25
- [20] 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. 20
- [21] J. Villasenor and O. Buneman. Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers. *Computer Physics Communications*, 69:306–316, March 1992. 25, 29

LITERATURA

- [22] 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. 20