

# SIMULAÇÃO PARTICLE IN CELL: DINÂMICA E ESTABILIDADE

Instituto Superior Técnico  
Mestrado Integrado em Engenharia Física Tecnológica  
Física Computacional

Alexandre Barbosa<sup>1</sup>, Miguel Roldão<sup>2</sup>

5 de Janeiro de 2020

## RESUMO

Usando um modelo Particle in Cell (PIC), simula-se um plasma unidimensional magneticamente neutro, com  $N = 10^5$  partículas, dois *beams* de eletrões com uma distribuição de velocidades dada e condições fronteira cíclicas, considerando os iões estacionários. O código da simulação é desenvolvido em C++ e são produzidas figuras que permitem visualizar a evolução temporal do sistema usando ROOT. A implementação computacional dos algoritmos de simulação é descrita. Ao variar a densidade de partículas, estuda-se a estabilidade do sistema, caracterizada pela ausência de formação de vórtices no espaço de fases, determinando-se o comprimento para o qual se torna instável. As limitações deste modelo são discutidas.

## 1 Introdução Teórica

O campo elétrico de um ensemble de  $N$  partículas carregadas resulta das contribuições de todas as cargas elétricas.

Um plasma uniforme magneticamente neutro, a uma dimensão, pode ser estudado como um sistema de  $N$  eletrões e  $N$  iões. Como a massa dos iões é muito superior à dos eletrões (por um fator de pelo menos  $10^3$ ), assume-se que, para escalas de tempo reduzidas, os iões estão estacionários, e considera-se apenas a dinâmica dos eletrões. De modo a simplificar o problema, considera-se que os iões têm densidade constante  $n_0$  e que, em média, a densidade de eletrões e iões é igual.

A equação do movimento de um eletrão é:

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\frac{qE(r_i)}{m_e} \quad (1)$$

A partir da Lei de Gauss a uma dimensão, obtém-se o campo através do potencial elétrico:

$$\begin{cases} \nabla \cdot E = \frac{\rho}{\varepsilon_0} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_{ions} - n_{eletrons}) \\ E(x) = -\frac{d\phi(x)}{dx} \end{cases} \quad (2)$$

$E$	campo elétrico
$\rho$	densidade de carga total
$\varepsilon_0$	permissividade elétrica do vácuo
$n$	densidade de partículas
$\phi$	potencial elétrico

As equações do movimento são normalizadas, em relação à frequência de plasma (a frequência típica de oscilações eletrostáticas de eletrões),  $\omega_p$ , e ao comprimento de Debye (acima do qual os eletrões exibem efeitos coletivos, *de plasma*),  $\lambda_D$ .

$$t \longrightarrow t \omega_p^{-1} = t \sqrt{\frac{\varepsilon_0 m_e}{n_0 e^2}} \quad \text{e} \quad x \longrightarrow x \lambda_D \quad (3)$$

A densidade é normalizada, dividindo por  $n_0$ , e usa-se um modelo *two-fluid* para o plasma, com uma distribuição inicial de velocidades *maxwelliana* para os dois *beams* de eletrões.

### 1.1 Discretização do Problema

A densidade eletrónica  $n$  é obtida através de um método PIC (*Particle in Cell*), discretizando o contínuo de coordenadas dos eletrões numa grelha espacial com `ngrid` células, de vértices uniformemente espaçados, separados por  $h = \frac{x_{max} - x_{min}}{ngrid}$ .

Se a posição  $r_i$  do eletrão se encontrar no intervalo  $[x_j, x_{j+1}]$ , então a densidade nas células  $j$  e  $j+1$  aumenta por:

$$\begin{cases} n_j \rightarrow n_j + \frac{x_{j+1} - r_i}{h^2} \\ n_{j+1} \rightarrow n_{j+1} + \frac{r_i - x_j}{h^2} \end{cases} \quad (4)$$

pelo que cada partícula incrementa a densidade por  $\frac{1}{h}$ .

<sup>1</sup> alexandre.barbosa@tecnico.ulisboa.pt, 93362

<sup>2</sup> miguel.roldao@tecnico.ulisboa.pt, 93405

## 2 Implementação Computacional

### 2.1 Classe PIC

Um dos objetivos deste projeto foi implementar a classe PIC, que permite evoluir no tempo a posição e velocidade de um ensemble de  $N$  partículas com uma dada distribuição inicial de velocidades e condições fronteira especificadas.

#### 2.1.1 Data Members

Os membros privados da classe incluem o vetor de velocidades dos *beams*, *velocity*, o número total de partículas, *Npart*, as coordenadas (início e fim) do domínio espacial *xmin* e *xmax*, o número de pontos da grelha espacial, *ngrid*, arrays com a posição, velocidade e campo elétrico de cada uma das partículas, *r*, *v* e *Efield*, com as coordenadas, densidade e potencial elétrico na grelha, *xgrid*, *density* e *potential*, a densidade média, *n0* e o tempo atual de simulação, *t*.

#### 2.1.2 Métodos da Classe

Além de um construtor e destrutor, e de um operador de *assignment*, na classe PIC são implementados diversos métodos que são usados no decorrer da simulação, nomeadamente:

- `FdistV(std::vector<double>, bool, bool)` que define a distribuição inicial de velocidades, e desenha um histograma com a distribuição gerada e um gráfico com a função de distribuição analítica.
- `Plot_Phase_Space(bool, bool)` que guarda e/ou mostra um *plot* do espaço de fases do sistema.
- `Density(bool, bool)` que calcula, em cada instante, o perfil de densidades na grelha espacial de acordo com a *e4* e guarda e/ou mostra o histograma correspondente a  $n_j - 1$ .
- `Poisson(bool, bool)` que calcula, em cada instante, o potencial na grelha espacial, guarda e/ou mostra o histograma correspondente e, de seguida, calcula o campo elétrico para cada partícula.
- `SetGrid()` que discretiza o domínio da simulação, ao criar uma grelha espacial entre *xmin* e *xmax*.
- `Electric_Effect(double dt)` que calcula o campo elétrico, e atualiza as velocidades e posições
- `CheckBoundaries()` que impõe as condições fronteira, conforme descrito na secção 2.2
- `TimeStep(double dt)` que avança a simulação no tempo por  $\Delta t \omega_p^{-1}$ , chamando os métodos `Electric_Effect` e `CheckBoundaries`.
- `double GetTime()` que retorna o tempo atual de simulação,  $t \omega_p^{-1}$ .

As funções em que o tipo foi omitido são do tipo `void`, e sempre que o método recebe dois `bool` como argumentos, estes servem para decidir se os *plots* que são desenhados nesse método são guardados e/ou mostrados, respetivamente.

### 2.2 Condições Iniciais e Fronteira do Problema

#### 2.2.1 Condições Iniciais

As condições iniciais para a posição e velocidade dos eletrões são definidas no método `FdistV`. A posição inicial das  $N$  partículas é aleatória, segundo uma distribuição uniforme no domínio espacial da simulação, para a qual se usa o método `Uniform(0, 1)` do ROOT, com uma semente aleatória.

As velocidades iniciais dos dois feixes de eletrões são geradas a partir da função de densidade de probabilidade  $F(v)$ :

$$F(v) \propto e^{-\frac{(v - v_b)^2}{2}} - e^{-\frac{(v + v_b)^2}{2}}$$

em que  $v_b$  é dado. A distribuição foi implementada pelo método de aceitação-rejeição de Box-Muller [1].

$$v_I = \sqrt{-2 \ln w} \cos(2\pi z) \quad \text{e} \quad v_{II} = \sqrt{-2 \ln w} \sin(2\pi z)$$

onde  $w$  e  $z$  são números aleatórios no intervalo  $[0, 1]$  e em que  $v_I$  e  $v_{II}$  são as velocidades de cada um dos *beams* de eletrões.

#### 2.2.2 Condições Fronteira da Posição e Velocidade

As condições fronteira para a posição das partículas são cíclicas, isto é, se após um incremento temporal, a partícula se encontrasse fora do domínio da simulação, então impõe-se:

- Se  $x_i > x_{max}$ , então  $x_i = x_i - L$ .
- Se  $x_i < x_{min}$ , então  $x_i = x_i + L$

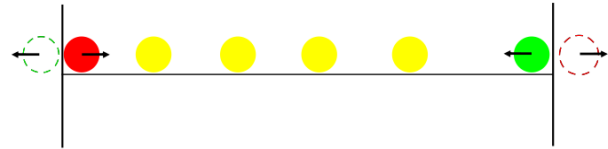


Figura 1: Condição Fronteira Cíclica. A tracejado verde, a partícula que teria uma posição  $x_i < x_{min}$  reaparece (a verde) no domínio da simulação. A tracejado vermelho, a partícula com uma posição  $x_i > x_{max}$  reaparece (a vermelho) no outro extremo do domínio, após o avanço temporal. A velocidade da partícula mantém-se inalterada nesta mudança de posição.

#### 2.2.3 Condição Fronteira do Potencial

O potencial elétrico do sistema é utilizado no cálculo do campo elétrico. Como se verifica a segunda equação do sistema 2, o potencial está definido a menos de uma constante. Utilizou-se a condição fronteira  $\phi(x_{min}) = \phi(x_{max}) = 0$ .

## 2.3 Métodos Numéricos

Os métodos descritos em seguida são utilizados para calcular a posição, velocidade e campo elétrico de cada partícula, bem como a densidade e potencial na grelha espacial, para cada incremento temporal  $dt$ , até ao final da simulação.

### 2.3.1 Densidade de Partículas

A densidade das partículas é calculada através do método 4.

A densidade média,  $n_0$  é definida como:

$$n_0 = \frac{N}{L} \quad \text{onde} \quad L = x_{max} - x_{min} \quad (5)$$

### 2.3.2 Cálculo do Potencial Elétrico

O potencial elétrico foi calculado através do método de diferenças finitas para problemas de valor de fronteira (BVP).

A segunda derivada do campo elétrico  $\phi$  pode ser escrita como:

$$\frac{d^2\phi}{dt^2} = \frac{\phi(x_i + h) - 2\phi(x_i) + \phi(x_i - h)}{h^2} \quad (6)$$

O cálculo do potencial resume-se a resolver a equação:

$$\frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & \vdots \\ 0 & 1 & -2 & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \dots & & 1 & -2 \end{bmatrix} \vec{\phi} = \begin{bmatrix} 0 \\ n_1 - 1 \\ \vdots \\ n_{ngrid-2} - 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

em que  $h$  é a resolução espacial,  $h = \frac{x_{max} - x_{min}}{ngrid}$  e  $n$  é o vetor de densidades normalizado (secção 2.3.1)

Como a matriz é tridiagonal, utilizou-se o método `EqSolver::TridiagonalSolver()` já definido para a resolução do sistema matricial (7).

### 2.3.3 Cálculo do Campo Elétrico

Obtendo um potencial discreto utilizou-se a classe `Spline3Interpolator` para calcular o campo elétrico para cada eletrão, com um método adicional que retorna a derivada numérica por interpolação.

### 2.3.4 Evolução Temporal

Após calcular o campo elétrico e sabendo tanto as posições como a velocidade de todas as partículas, a evolução temporal do sistema resume-se a resolver a equação diferencial 1.

Utilizou-se o método Runge-Kutta de ordem 4 para ODEs de 1ª ordem. Apesar da equação 1 ser de segunda ordem, pode ser escrita como um sistema de duas equações de 1ª ordem.

$$\begin{cases} \frac{dr_i}{dt} = v_i \\ \frac{dv_i}{dt} = -E(r_i) \end{cases} \quad (8)$$

Na definição das TFormulas do ROOT, definiu-se uma terceira equação, em que se mantém o campo elétrico constante. Em cada incremento temporal ocorre apenas uma iteração de Runge-Kutta, pois  $dt$  é exatamente  $t_{max} - t_{min}$ .

## 3 Simulação da Dinâmica de $10^5$ Partículas

Simulámos a dinâmica de um *ensemble* de  $N = 100,000$  eletrões, com os seguintes parâmetros:  $v_b = 5 \lambda_D \omega_p$ ,  $x_{min} = 0 \lambda_D$ ,  $x_{max} = 50 \lambda_D$ , uma resolução espacial  $dx = 0,05 \lambda_D$  e uma resolução temporal  $dt = 0,05 \omega_p^{-1}$ , durante um tempo de simulação  $T = 60 \omega_p^{-1}$ .

A distribuição inicial de velocidades representada na figura 2, onde se observam dois picos simétricos que correspondem aos dois *beams* de eletrões com velocidades opostas, o que se aproxima do gráfico da função de distribuição analítica e corresponde a duas bandas uniformes no espaço de fases.

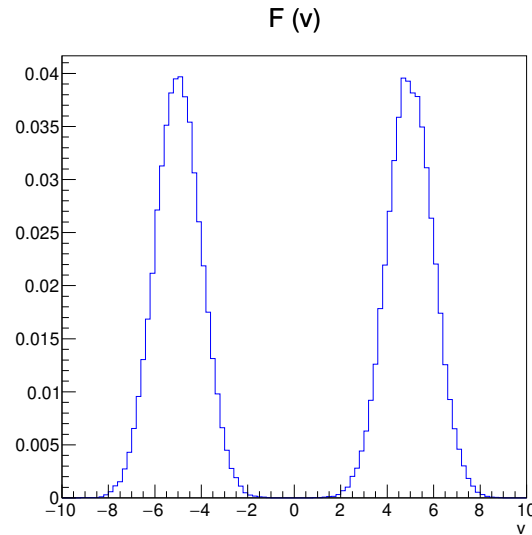
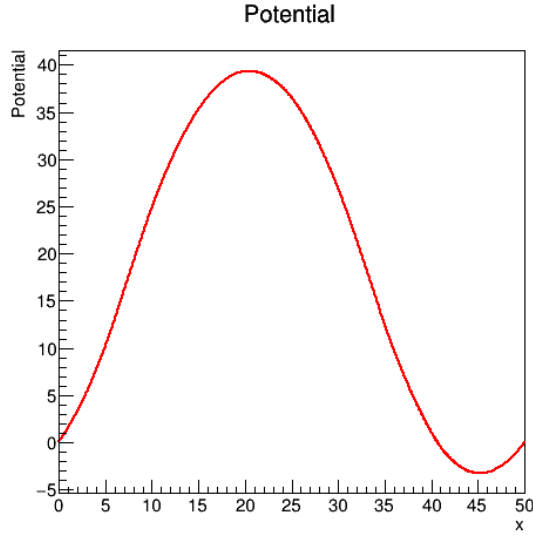


Figura 2: Distribuição Inicial de Velocidades

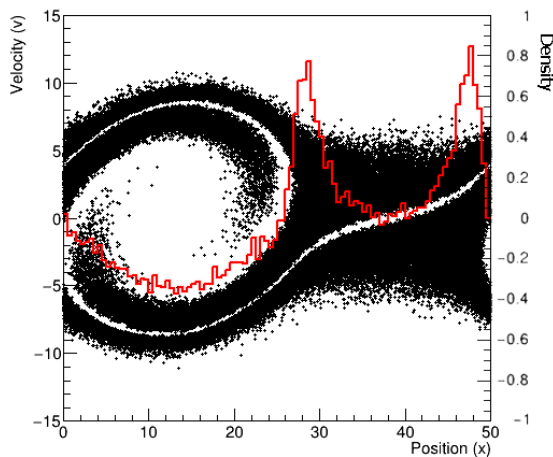
Contudo, ao longo da simulação, as bandas curvam até converter o espaço de fases num conjunto de vórtices ligados; um estado que evidencia instabilidade *twostream* (discutida na secção 4), que seria uma preocupação num acelerador de partículas, em que pode haver feixes de partículas carregadas com velocidades contrárias, limitando a *beam current* [2].

O movimento dos eletrões nesta fase da simulação é uma oscilação *quase-periódica* com um potencial que aumenta ao longo da simulação, evoluindo para um potencial aparentemente sinusoidal, representado na figura 3.


 Figura 3: Potencial em  $t = 57.08 \omega_p^{-1}$ 

A partir da análise da densidade e do espaço de fases após a formação de vórtices, obtém-se a dispersão dos elétrons no domínio de simulação (figura 4). O vórtice no espaço de fases corresponde à zona de maior potencial da grelha espacial e produz uma flutuação da densidade (*bunching*).

A área dos vórtices no espaço de fases é proporcional à energia dos elétrons no movimento (em aproximação) harmónico. A frequência de oscilação para um elétron no vórtice não é, numa análise cuidada, constante. O sistema torna-se instável ao fim de cerca de  $15 \omega_p^{-1}$ . O potencial aumenta rapidamente quando as bandas iniciais no espaço de fases se começam a deformar, e oscila quando este é um conjunto de vórtices.


 Figura 4: Densidade e Espaço de Fases em  $t = 20 \omega_p^{-1}$ 

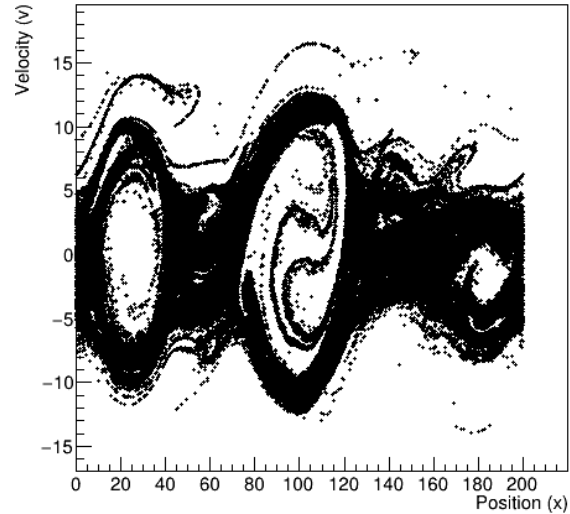
## 4 Estabilidade

A estabilidade de um plasma determina se as eventuais pequenas perturbações em certas partes do sistema são amplificadas, oscilam, ou, por amortecimento, desaparecem. A formação de vórtices no espaço de fases indica que os elétrons oscilam com um potencial *quase-periódico* que se deve às diferenças de densidade eletrónica na grelha espacial [3], efetivamente destruindo os *beams*, pelo que é uma medida de instabilidade.

De modo a analisar qualitativamente a estabilidade da dinâmica do sistema, caracterizada pela ausência de formação de vórtices no espaço de fases, simulámos a dinâmica do mesmo número de partículas, variando o comprimento do domínio espacial ( $x_{\max}$ ), com o objetivo de determinar, aproximadamente, a dimensão para a qual ocorre a transição de regime.

Verifica-se empiricamente que o regime é instável quando se aumenta  $x_{\max}$ , diminuindo a densidade de partículas, formando-se vórtices no decorrer da simulação.

### Phase Space


 Figura 5: Espaço de Fases em  $t = 60 \omega_p^{-1}$  para  $L = 200 \lambda_D$ .

A partir de uma *ansatz* inicial de que a transição de regime ocorreria para  $x_{\max} = 30 \lambda_D$ , obteve-se, por bisseção de intervalos, uma sucessão de estimativas, apresentadas na tabela 1, a partir das quais se determinou o comprimento de transição de regime estável para instável,  $\Gamma$ , com precisão unitária.

$L (\lambda_D)$	Número de Vórtices
30	1
25	0
28	0
29	0

 Tabela 1: Determinação do comprimento  $\Gamma$ , com  $t = 60 \omega_p^{-1}$ .

Logo, obtém-se aproximadamente o valor de  $L = x_{\max}$  para o qual há a transição de regime,  $\Gamma = (29 \pm 1) \lambda_D$ .

A transição do regime estável para instável é ilustrada pela diferença entre os espaços de fase, em  $t = 60 \omega_p^{-1}$ , para  $x_{\max} = 29 \lambda_D$ , que se mantém praticamente inalterado (figura 6), e para  $x_{\max} = 30 \lambda_D$ , em que se forma um vórtice (figura 7).

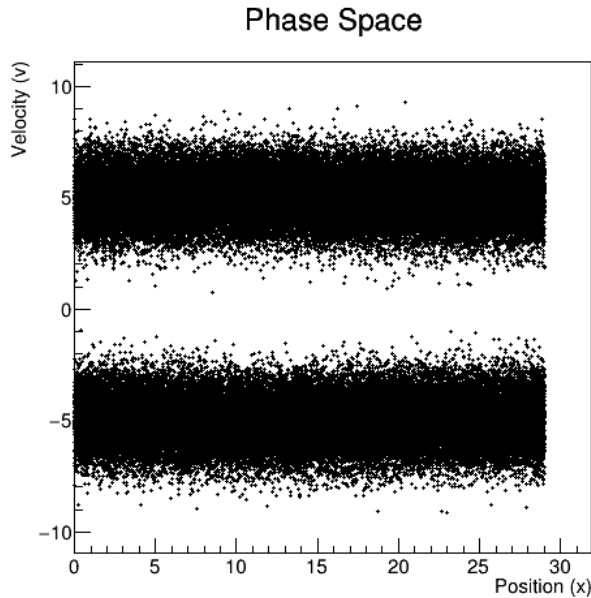


Figura 6: Espaço de Fases em  $t = 60 \omega_p^{-1}$  para  $L = 29 \lambda_D$ .

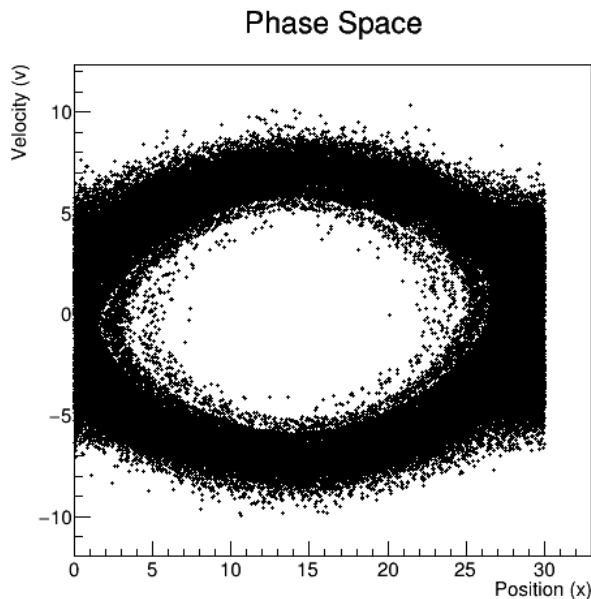


Figura 7: Espaço de Fases em  $t = 60 \omega_p^{-1}$  para  $L = 30 \lambda_D$ .

A instabilidade *two-stream* induzida pelo feixe de elétrons injetados no plasma leva a uma transferência de energia das partículas que leva à formação de ondas no plasma [4].

A instabilidade cresce até saturar quando as partículas ficarem presas no campo elétrico da onda [5].

Além das limitações inerentes a uma simulação PIC, este método tem por base a suposição de que, se ao fim de um dado tempo de simulação, um parâmetro que se manteve constante em todas as simulações ( $t = 60 \omega_p^{-1}$ ), não se formaram vórtices no espaço de fases, o sistema se pode considerar estável.

Contudo, nada garante *a priori* que um sistema, aparentemente estável durante um tempo de simulação  $t$ , se torne instável ao fim de um tempo  $T \gg t$ . Verificou-se que, para  $L = 29 \lambda_D$ , o sistema se mantinha estável até  $t = 100 \omega_p^{-1}$ , no entanto, nada se pode concluir acerca da estabilidade quando  $t \rightarrow \infty$ .

## 5 Limitações

Uma simulação PIC apresenta algumas limitações, incluindo o ruído estatístico que advém de ser usado um número reduzido de partículas ( $10^5$  nesta simulação), em comparação com as de um sistema real (com um número da ordem de  $N_A$ ) [3].

Uma vez que  $n_{\text{grid}} \ll N$ , existem muitas partículas em cada célula da grelha espacial, embora o campo elétrico seja calculado para cada partícula, os erros de interpolação podem afetar a validade do modelo para colisão de partículas carregadas.

A estabilidade da simulação para  $t \rightarrow \infty$  não é garantida, uma vez que não se analisou a conservação de energia associada aos métodos numéricos (i.e, Runge-Kutta 4) utilizados.

## Agradecimentos

Os autores agradecem a Pedro Afonso Cosme (DF-IST) pelos esclarecimentos informais sobre física de plasmas e por indicar bibliografia adequada ao nível académico dos autores.

## Referências

- [1] Sheldon Ross. *A First Course in Probability*. 8ª ed. pp. 443–446. Prentice Hall, 2002. ISBN: 9780136033134.
- [2] F. Zimmermann e G. Rumolo. “Two-Stream Problems in Accelerators”. Em: *Proceedings of the Second Asian Particle Accelerator Conference* (Pequim, China). 2001.
- [3] Richard Fitzpatrick. *Particle In-Cell Codes*. 2006. URL: <http://farside.ph.utexas.edu/teaching/329/lectures/node96.html> (acedido em 09/03/2006).
- [4] Thomas H. Stix. *Waves in Plasmas*. Nova Iorque. American Institute of Physics. Capítulo 7, 1992.
- [5] W. E. Drummond J. H. Malmberg T. M. O’Neil e J. R. Thompson. “Nonlinear Development of the Beam-Plasma Instability”. Em: *The Physics of Fluids* 2242.13 (1970). AIP, doi:10.1063/1.1693255.