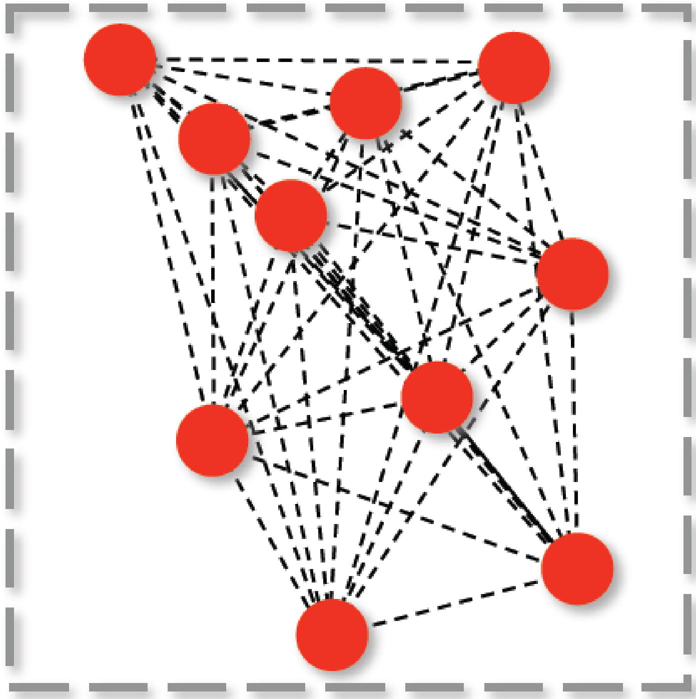
Částicové simulace

Pokud budu uvažovat interakce částice-částice N částic $\Rightarrow N^2$ sil

Při velkém přiblížení částic – velká změna rychlosti za malá Δt $\Rightarrow$ krátký časový krok



Takový přístup je možný pro $N \leq 1000$

Pro ilustraci 10^8 částic, 10 Tflop/s,

1 časový krok – 3 hodiny

10^4 časových kroků – 3 roky

Větší systém

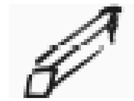
- ***Stromové kódy*** – interakce částice-klastr
- **Particle-In-Cell** - interakce částice-síťka

PIC je velmi rozšířená metoda

Nebudeme chtít přesný popis binárních interakcí, ale chceme naopak ekvivalent Vlasovovy rovnice. Tedy makroskopické elektromagnetické pole a pohyb částic v něm.

PIC - 1 časový krok ~ 0.3 ms, 10^4 kroků ~ 3 s

Zavedeme tedy síť bodů, pole budeme počítat v uzlech sítě a mezi nimi interpolovat, částice mají rozměry rovné buňce sítě - **makročástice**

V jedné dimenzi (1D) – desky o tloušťce 1 buňky  , 2D –  tyče, v 3D kvádry, částice mají konečné rozměry

Lze více složek rychlostí než dimenzí (1D2V, 1D3V, 2D3V)⇒el.proudy

Makročástice se mohou **prostupovat** (jsou to oblaky částic)

PIC – názorný, lze řešit NL problémy a najít meze analytických modelů

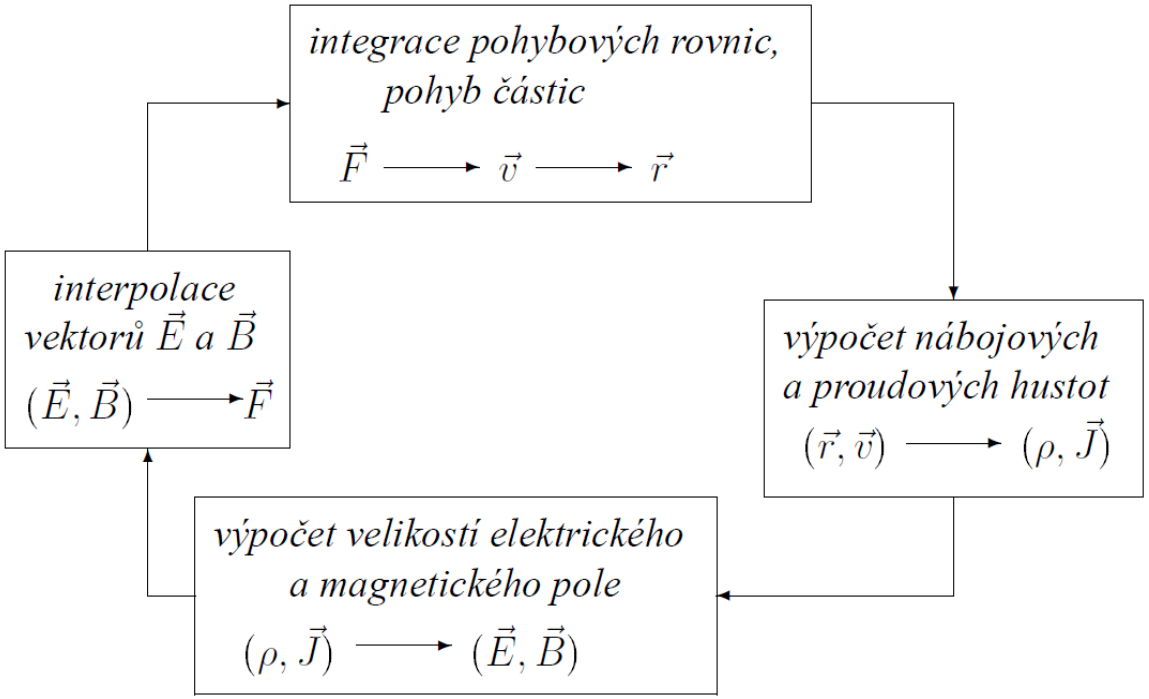
Cyklus PIC kódu

Z pohybových rovnic vypočtu rychlosti a polohy částic

Interpolací do bodů sítě vypočtu hustoty nábojů a proudů

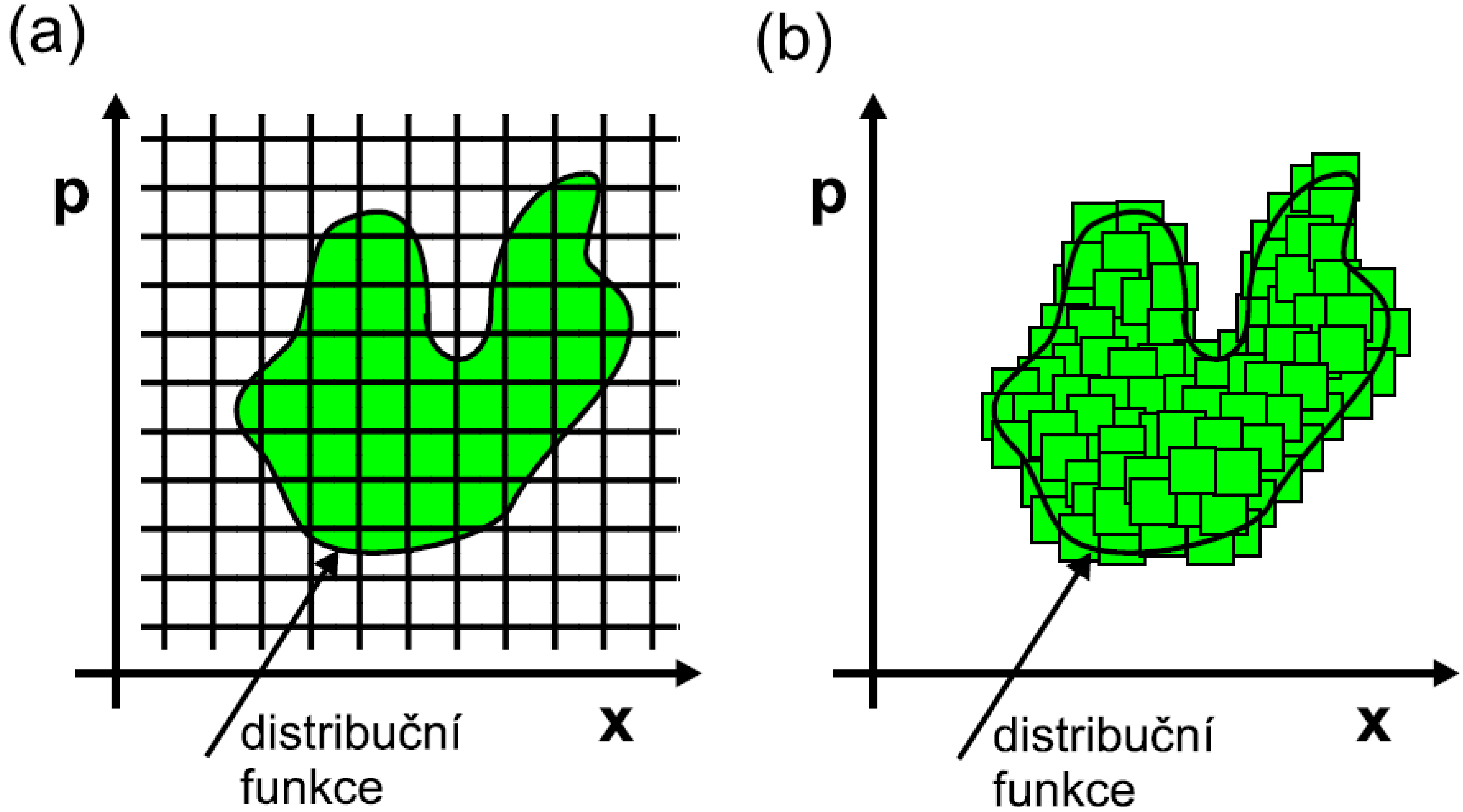
V bodech sítě spočtu pole

Interpolací do poloh částic spočtu síly na částice



<u>Numerické řešení Vlasovovy rovnice</u> – podstatně pomalejší, dělá se v méně dimenzích (často jen v 1D), není zatíženo šumem, výhodné pro chvosty rozdělení

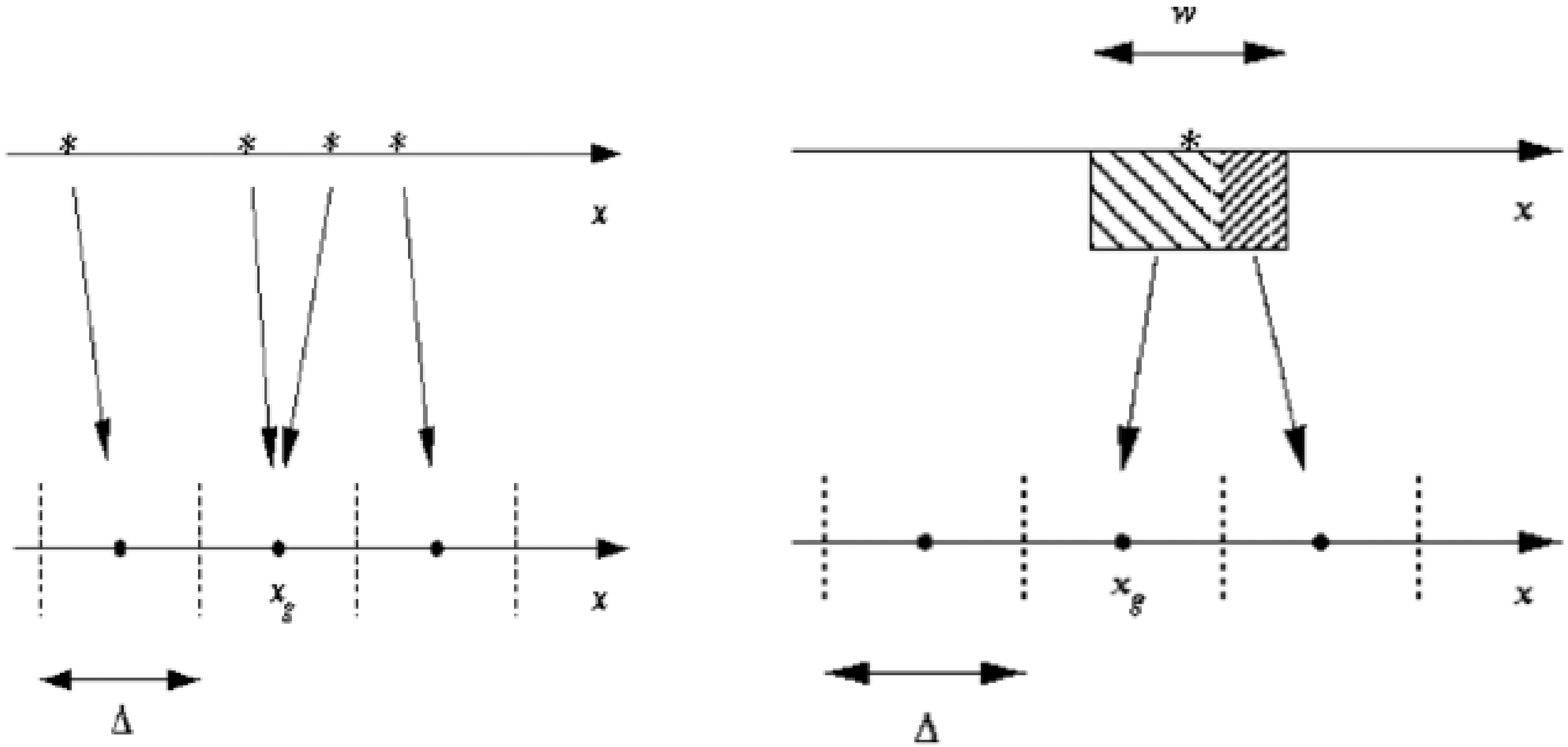
Metoda PIC je vlastně řešení Vlasovovy rovnice vzorkováním



PIC řeší Vlasovovu rovnici jen tam, kde jsou částice; snadno se paralelizuje

Přiřazení částic a interpolace síly

Přiřazení do nejbližšího bodu (1.řád)   Lineární int. (cloud in cell 2. řád)



Maxwellovy rovnice

N buněk (délka 1) – délka oblasti L=N, počet částic M, délka δ=1, počet částic na buňku n_{av}=M/L

Cloud-in-cell - část náboje v oblasti $x < (x_i + x_{i+1})/2$ přiřazena do bodu i

$$\Delta\rho_i = q(1-\Delta x) \qquad \Delta\rho_{i+1} = q\Delta x$$

Elektromagnetický kód – Maxwellovy rovnice – náboje a proudy
Ve cvičení elektrostatický kód ES1 → Poissonova rovnice

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \qquad E(i+1) = E(i) + \frac{\rho(i) + \rho(i+1)}{2\varepsilon_0}$$

kód ES1-Fourierova transformace $\quad ikE_k = \rho_k / \varepsilon_0$

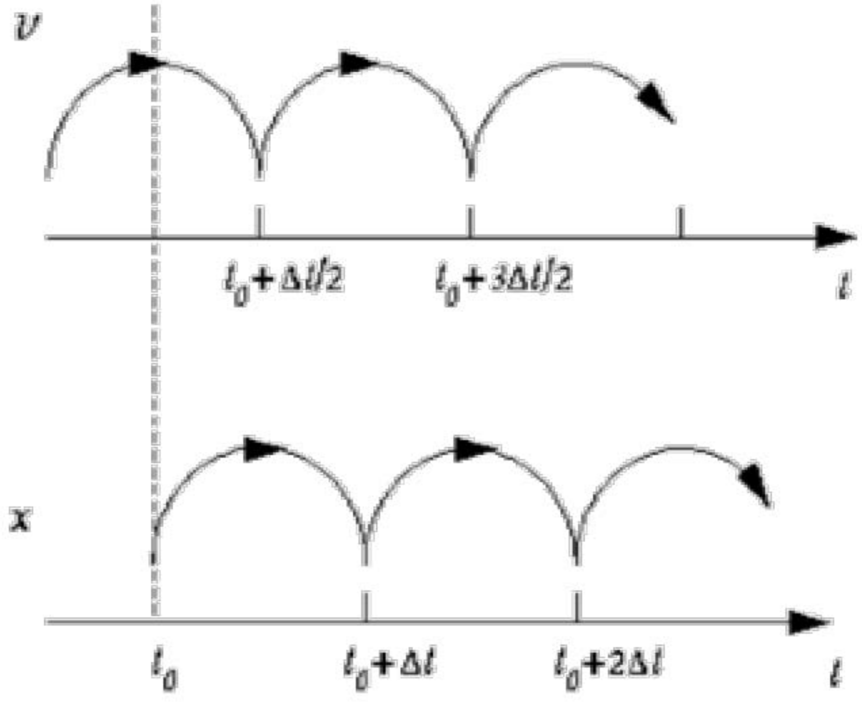
Působící síla v $x_i+\Delta x$ $\quad F = qE_i\left(1-\Delta x\right) + qE_{i+1}\Delta x$

Pro pohyb částic se často používá leap-frog metoda

Pohybová rovnice

$$\mathrm{v}^{n+1/2} = \mathrm{v}^{n-1/2} + F^n \Delta t / m$$

$$x^{n+1} = x^n + \mathrm{v}^{n+1/2}\Delta t$$



Normování (násobení konstantami zdržuje) $t' = \omega_{pe} t \qquad x' = x/\delta$

$$\mathrm{v}' = \frac{\mathrm{v}}{\omega_{\mathrm{pe}}\delta} \qquad E' = \frac{\varepsilon_0 E}{eN_{a\mathrm{v}}} = \frac{\varepsilon_0 E}{en_{a\mathrm{v}}\delta}$$

a rovnice přejdou do tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\,x'}{\mathrm{d}\,t'} = \mathrm{v}' \qquad \frac{\mathrm{d}\,\mathrm{v}'}{\mathrm{d}\,t'} = -E' \qquad \frac{\mathrm{d}\,E'}{\mathrm{d}\,x'} = 1 - \frac{N}{N_{a\mathrm{v}}}$$

nejjednodušší případ

rovnice pro elektrony, ionty jako homogenní neutralizující pozadí

Kontrola – zachování celkové energie

$$\epsilon = \sum_{j=1}^{M} \frac{m}{2} \mathrm{v}_{\mathrm{j}}^2 + \sum_{i=1}^{N} \frac{\varepsilon_0 E_i^2}{2} \delta = \frac{m\omega_{pe}^2 \delta^2}{2} \left[\sum_{j=1}^{M} \mathrm{v}'^2_{\mathrm{j}} + N_{a\mathrm{v}} \sum_{i=1}^{N} E'^2_{\mathrm{i}} \right]$$

Kód ES1 – 1D elektrostatický nerelativistický, dnes pro výuku, pohyblivé ionty, možnost $B_0 \perp x$, periodické okraje *E(N+1)=E(1)*