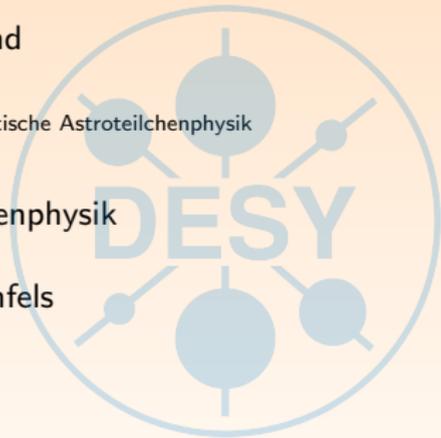


Particle-in-Cell Simulationen in 2.5 Dimensionen

Volkmar Wieland

Universität Potsdam/DESY Zeuthen, Theoretische Astroteilchenphysik

Schule für Astroteilchenphysik
2011
Obertrubach-Bärnfels



1 Einleitung

Plasma in der Physik
Plasmaphysik am Computer

2 Particle-in-Cell Simulationen

Plasma-Simulationen mit Teilchen
Das Leapfrog-Verfahren

3 THiSMPI

PIC-Simulationen in 2.5 Dimensionen
Parallelisierung

① Einleitung

Plasma in der Physik
Plasmaphysik am Computer

② Particle-in-Cell Simulationen

Plasma-Simulationen mit Teilchen
Das Leapfrog-Verfahren

③ THiSMPI

PIC-Simulationen in 2.5 Dimensionen
Parallelisierung

Was ist ein Plasma?

Was ist ein Plasma?

- Es ist ein ionisiertes Gas, d.h. Elektronen und Ionen sind voneinander getrennt.

Was ist ein Plasma?

- Es ist ein ionisiertes Gas, d.h. Elektronen und Ionen sind voneinander getrennt.
- Es ist quasi-neutral, aber elektrisch leitend.

Was ist ein Plasma?

- Es ist ein ionisiertes Gas, d.h. Elektronen und Ionen sind voneinander getrennt.
- Es ist quasi-neutral, aber elektrisch leitend.
- Es macht 99 % der sichtbaren Materie des Universums aus.

Was ist ein Plasma?

- Es ist ein ionisiertes Gas, d.h. Elektronen und Ionen sind voneinander getrennt.
- Es ist quasi-neutral, aber elektrisch leitend.
- Es macht 99 % der sichtbaren Materie des Universums aus.



Was ist ein Plasma?

- Es ist ein ionisiertes Gas, d.h. Elektronen und Ionen sind voneinander getrennt.
- Es ist quasi-neutral, aber elektrisch leitend.
- Es macht 99 % der sichtbaren Materie des Universums aus.

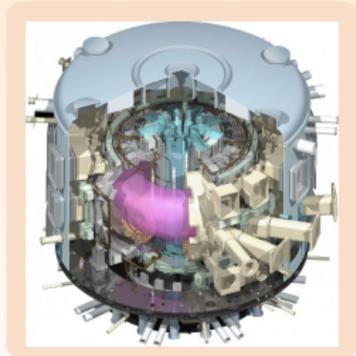


- Es treten Magnetfelder von $10^{-12} T$ (intergalaktisches Medium) bis $10^{11} T$ (Neutronenstern) auf.

Warum wollen wir ein Plasma am Computer simulieren?

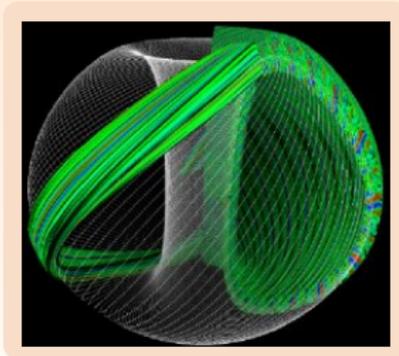
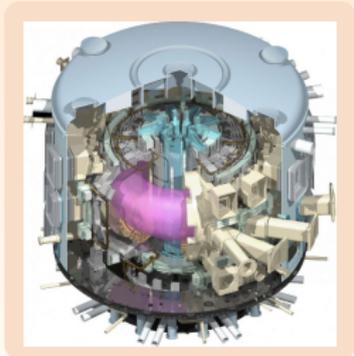
Warum wollen wir ein Plasma am Computer simulieren?

- Testen von Großgeräten vor der Konstruktion
→ Konstruktionszeit und Konstruktionskosten optimieren



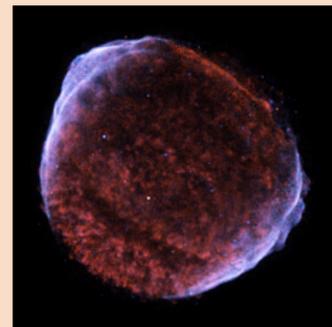
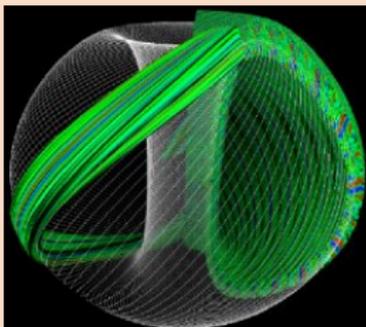
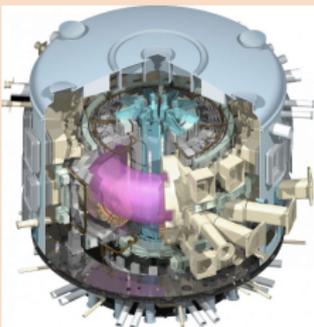
Warum wollen wir ein Plasma am Computer simulieren?

- Testen von Großgeräten vor der Konstruktion
→ Konstruktionszeit und Konstruktionskosten optimieren
- Bestimmung theoretischer Vorhersagen von Experimenten
→ Vergleich von Theorie und Experiment, Betriebskosten optimieren



Warum wollen wir ein Plasma am Computer simulieren?

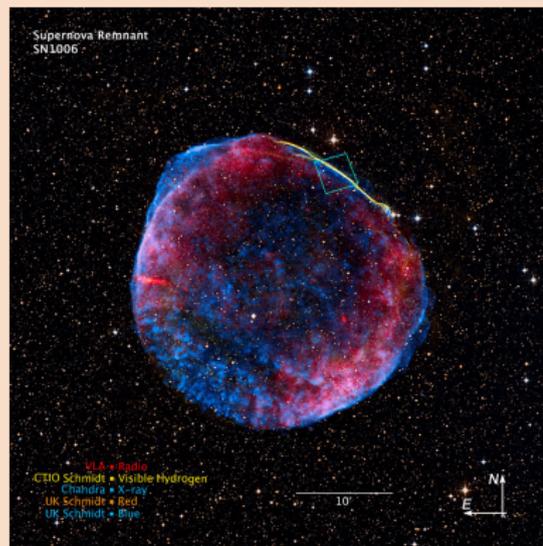
- Testen von Großgeräten vor der Konstruktion
→ Konstruktionszeit und Konstruktionskosten optimieren
- Bestimmung theoretischer Vorhersagen von Experimenten
→ Vergleich von Theorie und Experiment, Betriebskosten optimieren
- Überprüfung theoretischer Modelle astrophysikalischer Objekte
→ kein direkter Zugang möglich



Was wollen wir herausfinden?

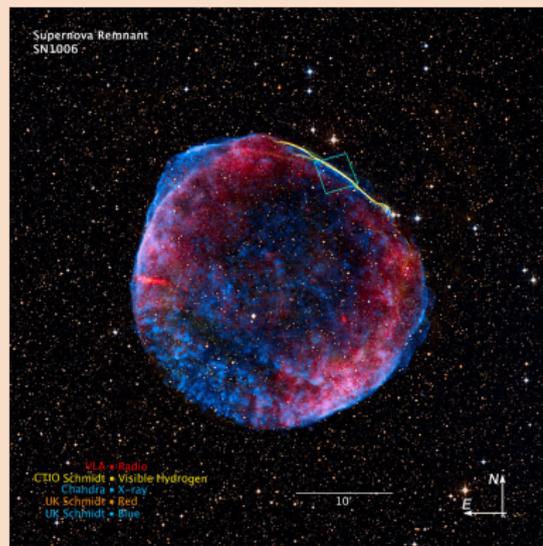
Was wollen wir herausfinden?

- Wie sehen die Magnetfelder in den Schockfronten von Supernovaüberresten aus?
→ Wir haben es hierbei mit einem turbulenten Plasma zu tun.



Was wollen wir herausfinden?

- Wie sehen die Magnetfelder in den Schockfronten von Supernovaüberresten aus?
→ Wir haben es hierbei mit einem turbulenten Plasma zu tun.
- Wie können Supernova-Schockfronten Teilchen beschleunigen?
→ Die kosmischen Teilchenbeschleuniger bringen Teilchen auf enorme Energien bis etwa 10^{15} eV (LHC: 10^{13} eV).



1 Einleitung

Plasma in der Physik
Plasmaphysik am Computer

2 Particle-in-Cell Simulationen

Plasma-Simulationen mit Teilchen
Das Leapfrog-Verfahren

3 THiSMPI

PIC-Simulationen in 2.5 Dimensionen
Parallelisierung

Wie kann man ein Plasma simulieren?

Wie kann man ein Plasma simulieren?

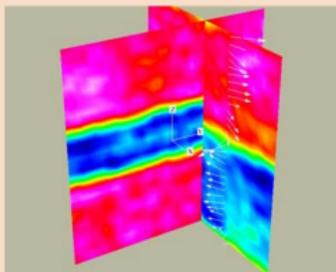
Fluid-Beschreibung

Magnetohydrodynamik (MHD)

Navier-Stokes-Gleichungen

+ Maxwell-Gleichungen

= Makro-Physik



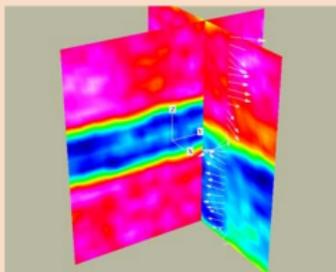
z.B. Simulation des Sonnenwindes

Wie kann man ein Plasma simulieren?

Fluid-Beschreibung

Magnetohydrodynamik (MHD)

Navier-Stokes-Gleichungen
+ Maxwell-Gleichungen
= Makro-Physik

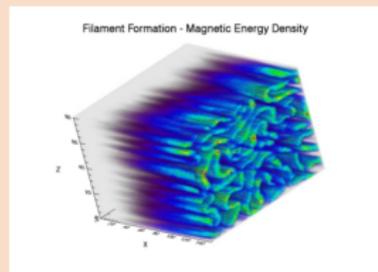


z.B. Simulation des Sonnenwindes

Kinetische Beschreibung

Particle-in-Cell (PIC) Simulationen

Maxwell-Gleichungen
+ Newton-Lorentz-Gleichung
= Mikro-Physik



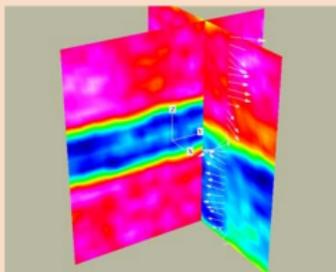
z.B. Simulation einer Schockfront

Wie kann man ein Plasma simulieren?

Fluid-Beschreibung

Magnetohydrodynamik (MHD)

Navier-Stokes-Gleichungen
 + Maxwell-Gleichungen
 = Makro-Physik

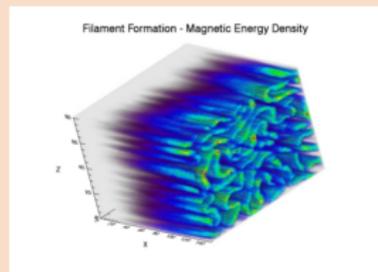


z.B. Simulation des Sonnenwindes

Kinetische Beschreibung

Particle-in-Cell (PIC) Simulationen

Maxwell-Gleichungen
 + Newton-Lorentz-Gleichung
 = Mikro-Physik



z.B. Simulation einer Schockfront

Hybrid-Beschreibung

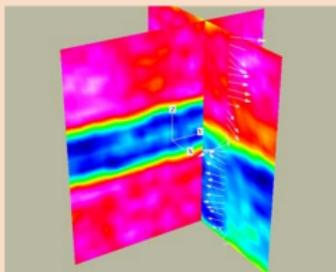
MHD + PIC

Wie kann man ein Plasma simulieren?

Fluid-Beschreibung

Magneto hydrodynamik (MHD)

Navier-Stokes-Gleichungen
 + Maxwell-Gleichungen
 = Makro-Physik

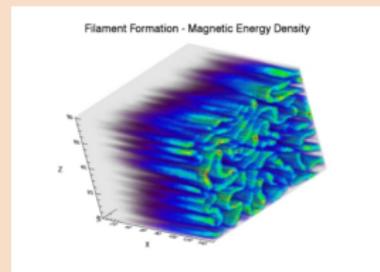


z.B. Simulation des Sonnenwindes

Kinetische Beschreibung

Particle-in-Cell (PIC) Simulationen

Maxwell-Gleichungen
 + Newton-Lorentz-Gleichung
 = Mikro-Physik



z.B. Simulation einer Schockfront

Hybrid-Beschreibung

MHD + PIC

Welche Zutaten brauchen wir?

Welche Zutaten brauchen wir?

- Teilchen und Verteilung: Elektronen (−) und Ionen (+)
- Felder: elektrische (\mathbf{E}) und magnetische (\mathbf{B})
- Maxwell-Gleichungen:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

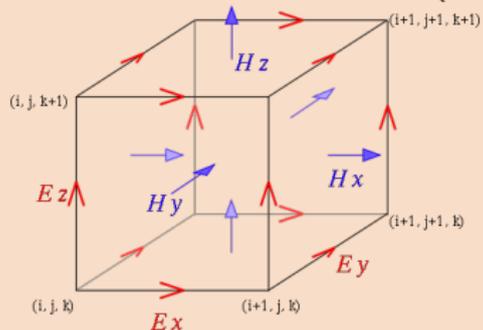
- Newton-Lorentz-Gleichung:

$$\frac{d(\gamma \mathbf{v})}{dt} = \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Welche Kompromisse müssen wir eingehen?

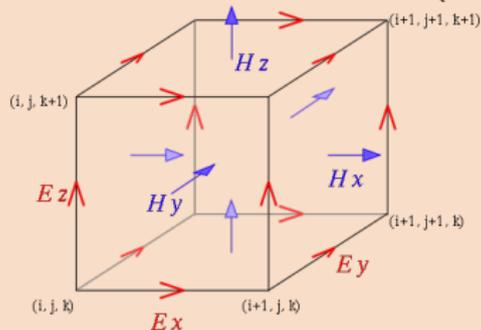
Welche Kompromisse müssen wir eingehen?

- 1 Wir müssen ein numerisches (finites) Gitter in Raum und Zeit benutzen.



Welche Kompromisse müssen wir eingehen?

- Wir müssen ein numerisches (finites) Gitter in Raum und Zeit benutzen.

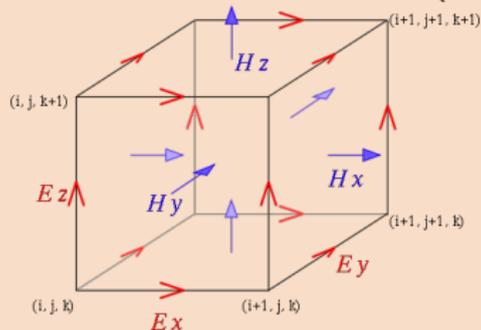


- Wir müssen die Anzahl der Teilchen reduzieren.

$$n = 10^6 - 10^{22} \text{ cm}^{-3} \rightarrow 10^0 - 10^2 \text{ cm}^{-3}$$

Welche Kompromisse müssen wir eingehen?

- Wir müssen ein numerisches (finites) Gitter in Raum und Zeit benutzen.



- Wir müssen die Anzahl der Teilchen reduzieren.

$$n = 10^6 - 10^{22} \text{ cm}^{-3} \rightarrow 10^0 - 10^2 \text{ cm}^{-3}$$

- Wir müssen Naturkonstanten verändern.

$$\text{z.B. } \frac{m_p}{m_e} \approx 1836 \rightarrow 100, \epsilon_0 = 1, \mu_0 = \frac{1}{c^2}$$

Welche Konsequenzen ergeben sich daraus?

Welche Konsequenzen ergeben sich daraus?

- 1 Wir erhalten finite Differenzen in den verwendeten Gleichungen.

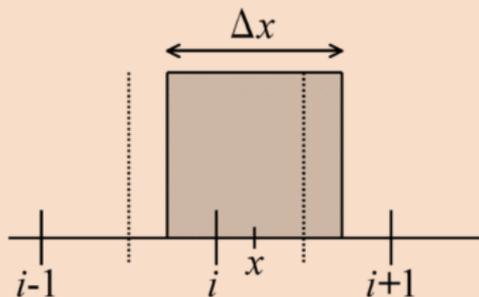
$$\frac{d}{dx} \rightarrow \frac{\Delta_i}{\Delta x}, \quad \frac{d}{dy} \rightarrow \frac{\Delta_j}{\Delta y}, \quad \frac{d}{dz} \rightarrow \frac{\Delta_k}{\Delta z}, \quad \frac{d}{dt} \rightarrow \frac{\Delta_t}{\Delta t}$$

Welche Konsequenzen ergeben sich daraus?

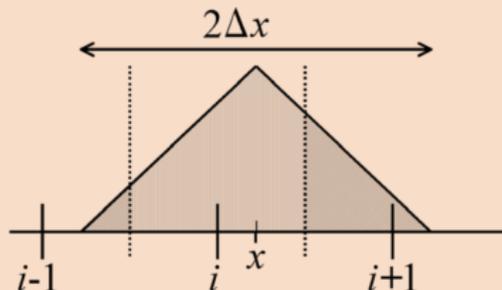
- ① Wir erhalten finite Differenzen in den verwendeten Gleichungen.

$$\frac{d}{dx} \rightarrow \frac{\Delta_i}{\Delta x}, \quad \frac{d}{dy} \rightarrow \frac{\Delta_j}{\Delta y}, \quad \frac{d}{dz} \rightarrow \frac{\Delta_k}{\Delta z}, \quad \frac{d}{dt} \rightarrow \frac{\Delta_t}{\Delta t}$$

- ② Wir erhalten Teilchen mit finiter Größe (Ladungswolken statt Punktladungen).



Kastenförmiger (PIC) Formfaktor



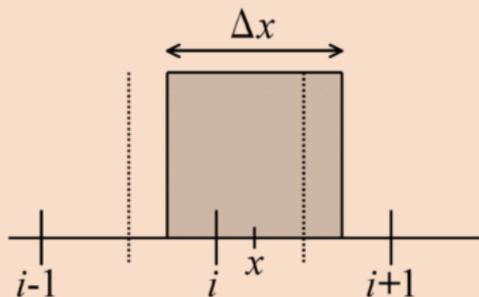
Triangular Shape Cloud (TSC) Formfaktor

Welche Konsequenzen ergeben sich daraus?

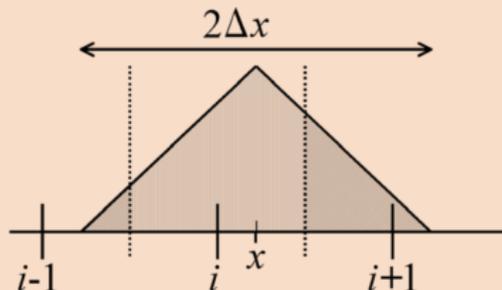
- ① Wir erhalten finite Differenzen in den verwendeten Gleichungen.

$$\frac{d}{dx} \rightarrow \frac{\Delta_i}{\Delta x}, \quad \frac{d}{dy} \rightarrow \frac{\Delta_j}{\Delta y}, \quad \frac{d}{dz} \rightarrow \frac{\Delta_k}{\Delta z}, \quad \frac{d}{dt} \rightarrow \frac{\Delta_t}{\Delta t}$$

- ② Wir erhalten Teilchen mit finiter Größe (Ladungswolken statt Punktladungen).



Kastenförmiger (PIC) Formfaktor



Triangular Shape Cloud (TSC) Formfaktor

- ③ Wir müssen die Parameter so wählen, dass die Eigenschaften eines Plasmas reproduziert werden (z.B. Debye-Länge, Plasmafrequenz, Größe des Gitters).

Wie läuft eine PIC-Simulation ab?

Teilchen

Platzierung auf dem Gitter

\mathbf{x}, \mathbf{v}

Wie läuft eine PIC-Simulation ab?

Teilchen

Platzierung auf dem Gitter

\mathbf{x}, \mathbf{v}



Ladungsverteilung

Interpolation auf das Gitter

$\mathbf{x}, \mathbf{v} \rightarrow \rho, \mathbf{J}$

Wie läuft eine PIC-Simulation ab?

Teilchen

Platzierung auf dem Gitter

$$\mathbf{x}, \mathbf{v}$$

Ladungsverteilung

Interpolation auf das Gitter

$$\mathbf{x}, \mathbf{v} \rightarrow \rho, \mathbf{J}$$

E- und B-Felder

Auswertung der
Maxwell-Gleichungen

$$\rho, \mathbf{J} \rightarrow \mathbf{E}, \mathbf{B}$$

Wie läuft eine PIC-Simulation ab?

Teilchen

Platzierung auf dem Gitter

 \mathbf{x}, \mathbf{v}

Ladungsverteilung

Interpolation auf das Gitter

 $\mathbf{x}, \mathbf{v} \rightarrow \rho, \mathbf{J}$

E- und B-Felder

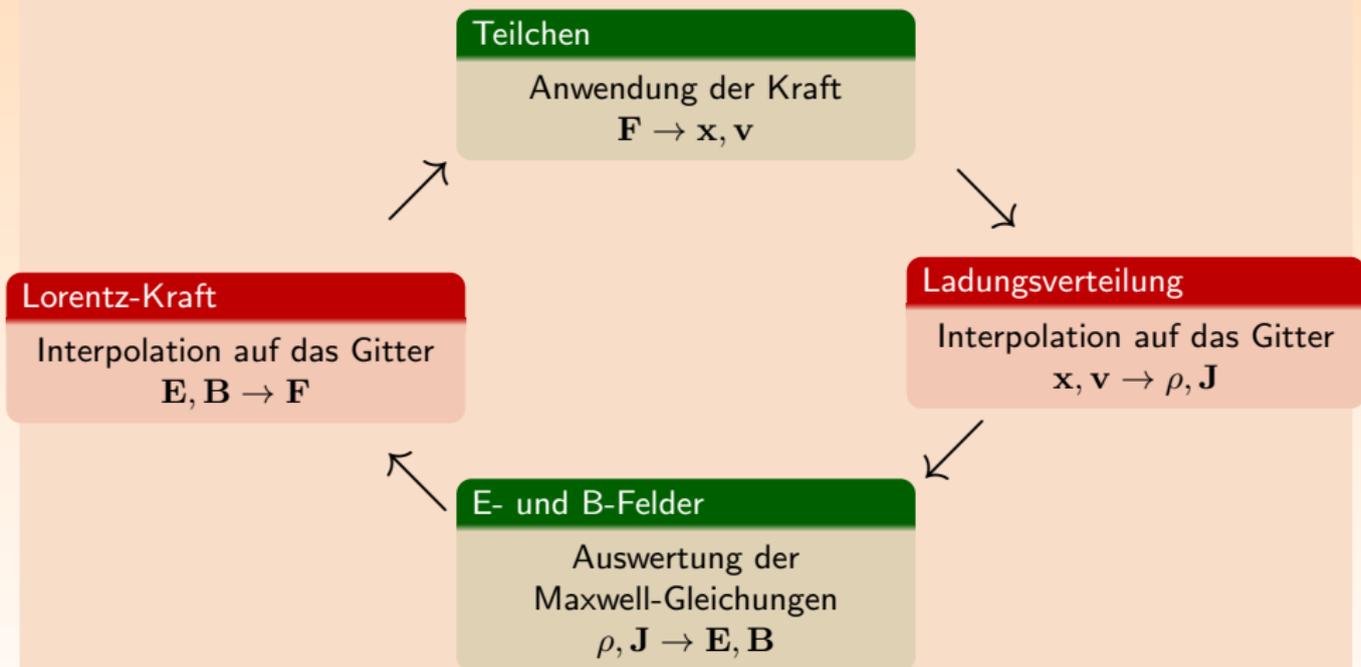
Auswertung der
Maxwell-Gleichungen $\rho, \mathbf{J} \rightarrow \mathbf{E}, \mathbf{B}$

Lorentz-Kraft

Interpolation auf das Gitter

 $\mathbf{E}, \mathbf{B} \rightarrow \mathbf{F}$

Wie läuft eine PIC-Simulation ab?



1 Einleitung

Plasma in der Physik
Plasmaphysik am Computer

2 Particle-in-Cell Simulationen

Plasma-Simulationen mit Teilchen
Das Leapfrog-Verfahren

3 THiSMPI

PIC-Simulationen in 2.5 Dimensionen
Parallelisierung

Was ist THiSMPI?

- Unsere Arbeitsgruppe nutzt den PIC-Code **THiSMPI**.

Was ist THiSMPI?

- Unsere Arbeitsgruppe nutzt den PIC-Code **THiSMPI**.
- Dies steht für:
Two-and-a-**H**alf-Dimensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface.

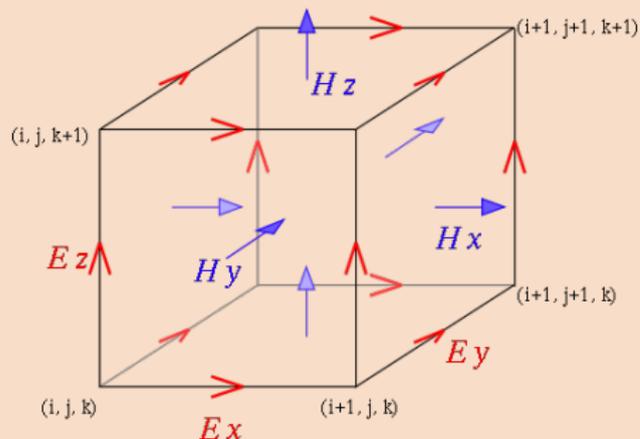
Was ist THiSMPI?

- Unsere Arbeitsgruppe nutzt den PIC-Code **THiSMPI**.
- Dies steht für:
Two-and-a-**H**alf-Dimensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface.
- Der Code ist:
 - 2.5-dimensional
 - relativistisch
 - in FORTRAN 77 geschrieben

Was bedeutet 2.5 Dimensionen?

THiSMPI – Two-and-a-Half-Dimensional Stanford with Message Passing Interface

3D



$$\mathbf{x} = (x, y, z)$$

$$\mathbf{v} = (v^x, v^y, v^z)$$

$$\mathbf{E} = (E^x, E^y, E^z)$$

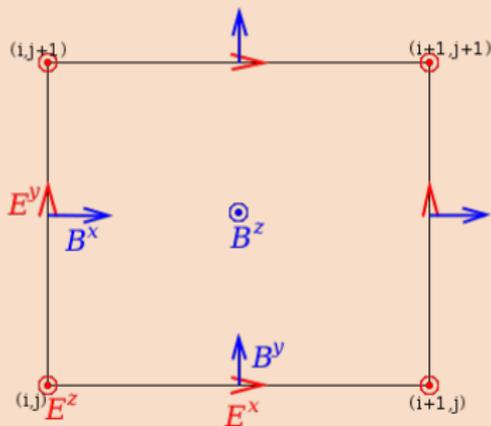
$$\mathbf{B} = (B^x, B^y, B^z)$$

$$\nabla = \left(\frac{d}{dx}, \frac{d}{dy}, \frac{d}{dz} \right)$$

Was bedeutet 2.5 Dimensionen?

THiSMPI – Two-and-a-Half-Dimensional Stanford with Message Passing Interface

2.5D



$$\mathbf{x} = (x, y, z)$$

$$\mathbf{v} = (v^x, v^y, v^z)$$

$$\mathbf{E} = (E^x, E^y, E^z)$$

$$\mathbf{B} = (B^x, B^y, B^z)$$

$$\nabla = \left(\frac{d}{dx}, \frac{d}{dy}, \frac{d}{dz} \right)$$

Was bedeutet MPI?

THiSMPI – **T**wo-and-a-**H**alf-Dimensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface

Der Code nutzt die Technologie **MPI** (**M**essage **P**assing **I**nterface) zur Parallelisierung.

Was bedeutet MPI?

THiSMPI – **T**wo-and-a-**H**alf-**D**imensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface

Der Code nutzt die Technologie **MPI** (**M**essage **P**assing **I**nterface) zur Parallelisierung.

Gitter

Was bedeutet MPI?

THiSMPI – **T**wo-and-a-Half-Dimensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface

Der Code nutzt die Technologie **MPI** (**M**essage **P**assing **I**nterface) zur Parallelisierung.

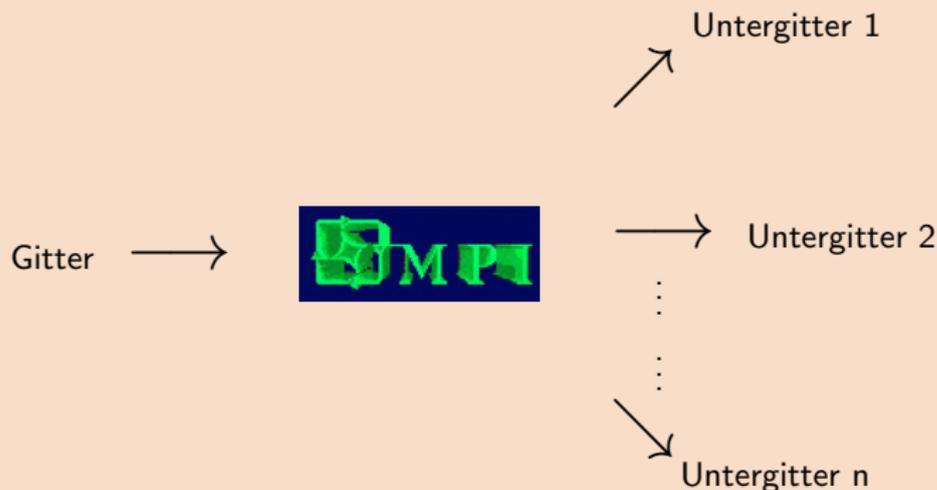
Gitter →



Was bedeutet MPI?

THiSMPI – **T**wo-and-a-Half-Dimensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface

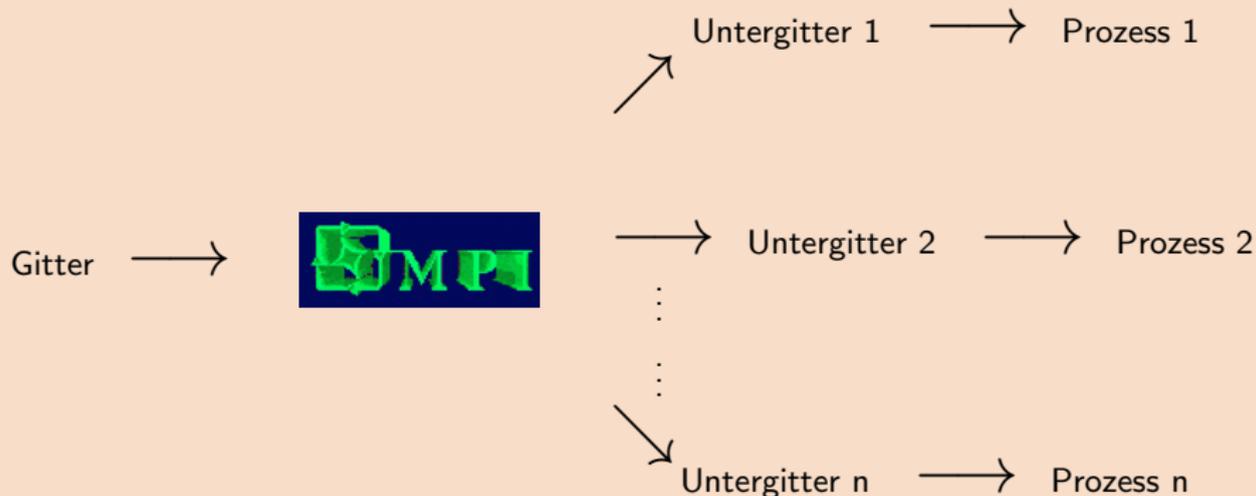
Der Code nutzt die Technologie **MPI** (**M**essage **P**assing **I**nterface) zur Parallelisierung.



Was bedeutet MPI?

THiSMPI – **T**wo-and-a-Half-Dimensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface

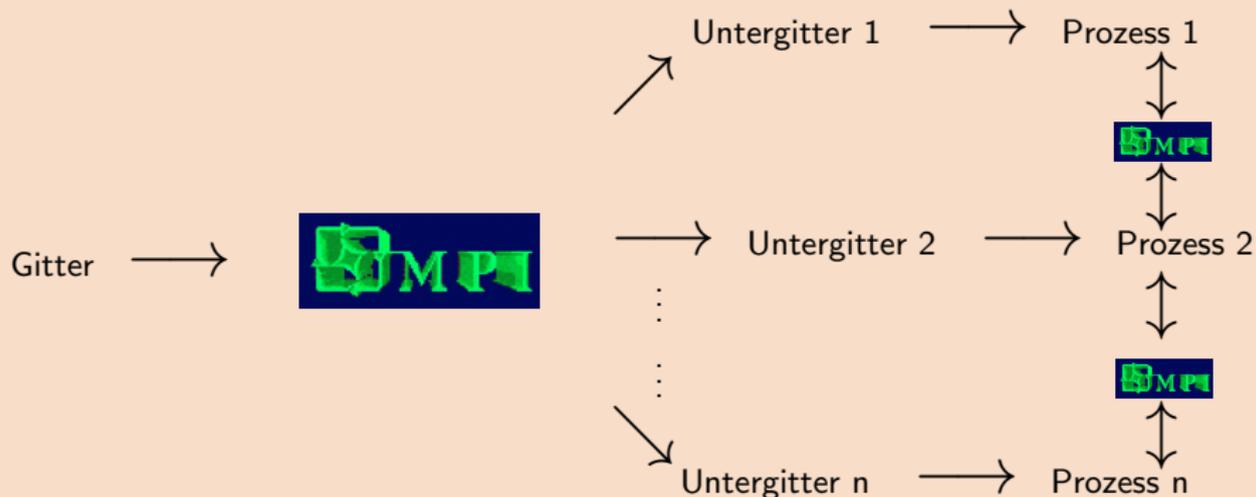
Der Code nutzt die Technologie **MPI** (**M**essage **P**assing **I**nterface) zur Parallelisierung.



Was bedeutet MPI?

THiSMPI – **T**wo-and-a-Half-Dimensional **S**tanford with **M**essage **P**assing **I**nterface

Der Code nutzt die Technologie **MPI** (**M**essage **P**assing **I**nterface) zur Parallelisierung.



Zusammenfassung

Zusammenfassung

- Wir betreiben **Plasma-Simulationen am Computer** um Theorie und Experiment miteinander zu vergleichen oder um astrophysikalische Objekte zu simulieren.

Zusammenfassung

- Wir betreiben **Plasma-Simulationen am Computer** um Theorie und Experiment miteinander zu vergleichen oder um astrophysikalische Objekte zu simulieren.
- Ein **Particle-in-Cell (PIC)** Code nutzt die Maxwell-Gleichungen und die Lorentz-Kraft um die Wechselwirkung von Ladungswolken und elektromagnetischen Feldern auf einem numerischen Gitter zu simulieren.

Zusammenfassung

- Wir betreiben **Plasma-Simulationen am Computer** um Theorie und Experiment miteinander zu vergleichen oder um astrophysikalische Objekte zu simulieren.
- Ein **Particle-in-Cell (PIC)** Code nutzt die Maxwell-Gleichungen und die Lorentz-Kraft um die Wechselwirkung von Ladungswolken und elektromagnetischen Feldern auf einem numerischen Gitter zu simulieren.
- Wir benutzen den Code **THiSMPI**, der PIC-Simulationen in 2.5 Dimensionen ermöglicht. Dabei sind die Teilchen und Gradienten auf 2 Dimensionen beschränkt, während Geschwindigkeit und Felder 3 Komponenten besitzen.

Zusammenfassung

- Wir betreiben **Plasma-Simulationen am Computer** um Theorie und Experiment miteinander zu vergleichen oder um astrophysikalische Objekte zu simulieren.
- Ein **Particle-in-Cell (PIC)** Code nutzt die Maxwell-Gleichungen und die Lorentz-Kraft um die Wechselwirkung von Ladungswolken und elektromagnetischen Feldern auf einem numerischen Gitter zu simulieren.
- Wir benutzen den Code **THiSMPI**, der PIC-Simulationen in 2.5 Dimensionen ermöglicht. Dabei sind die Teilchen und Gradienten auf 2 Dimensionen beschränkt, während Geschwindigkeit und Felder 3 Komponenten besitzen.
- Mit diesem Code wollen wir die magnetischen Eigenschaften von **Supernova-Schockfronten** und deren Funktionsweise als kosmische Teilchenbeschleuniger simulieren.

The last slide



"Compassion. That's the one thing no machine ever had. Maybe it's the one thing that keeps men ahead of them."

Dr. McCoy zu Captain Kirk und Commander Spock in "The Ultimate Computer"