



## PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Proyecto Interno  Proyecto Semilla  Proyecto Junior  Proyecto Multi e Inter Disciplinario

Investigación Básica  Investigación Aplicada  Investigación Pedagógica  Innovación

**DEPARTAMENTO(S):**

1. Departamento de Física ✓
- 2.

**LINEA(S) DE INVESTIGACIÓN:**

1. Fundamentos de física ✓
- 2.

**1 Proyecto de Investigación**

**Título:**

Simulaciones tipo particle-in-cell de sistemas fluidos y magnetohidrodinámicos ✓

**Resumen del proyecto (máximo 200 palabras)**

El plasma es un sistema compuesto de partículas cargadas, que interactúan entre sí a través de campos electromagnéticos externos o auto-consistentes. Tomando en consideración el alto poder computacional requerido para estudiar numéricamente estos sistemas en escalas pequeñas, el método numérico más ampliamente usado es el método particle-in-cell (PIC). Cada algoritmo PIC se escribe en función de la escala espacial y temporal de interés.

En este Proyecto se desarrollará un algoritmo y un código PIC cinético no relativista, focalizado en problemas propios de laboratorios de plasmas poco colisionales; y que pueda incluir modificaciones fluidas para ocuparse de problemas propios de plasmas espaciales no colisionales. En particular, este código servirá de apoyo al equipo de simulaciones numéricas del satélite Turbulence Heating Observer (THOR), candidato para la siguiente misión M4 de la Agencia Espacial Europea (ESA). Misión que tiene como objetivos principales entender la disipación turbulenta de energía y la energización de partículas en plasmas. En este sentido, se espera que éste Proyecto entregue a la comunidad científica una herramienta numérica para el estudio de sistemas fluidos y cinéticos, naturales o de laboratorio.

**Palabras clave (4-6):**

Particle-in-cell, fluidos, teoría cinética, plasmas,



**5 Objetivos, relevancia, productos y resultados esperados de esta propuesta de investigación**

**5.1 Objetivos**

**5.1.1 Objetivo General**

- Desarrollar un código particle-in-cell (PIC) para estudios de naturaleza fluida y magnetohidrodinámica en plasmas no colisionales.

**5.1.2 Objetivos Específicos**

- a. Escribir un algoritmo PIC, que resuelva el sistema de ecuaciones no lineales del modelo Hall Magneto-hidrodinámico (HMHD).
- b. Paralelizar el algoritmo PIC en lenguaje OpenMP, MPI o mixto, dependiendo de las características físicas del computador en el que se lo implemente.
- c. Gestionar el uso del computador de alto rendimiento (HPC) de la corporación ecuatoriana CEDIA y del centro de modelamiento MODEMAT de la EPN, junto con el soporte técnico de dichas entidades. Para lo cual se ha enviado un proyecto preliminar denominado "Estudio numérico de plasmas astrofísicos y atmosféricos: Aplicaciones al clima terrestre, espacial, e interestelar."

**5.2 Relevancia de esta propuesta de investigación y su relación con la(s) Línea(s) de investigación asociadas.**

El plasma es un estado de la materia, descrito como un gas totalmente ionizado. En el Universo, el 96% de la materia conocida se encuentra en estado de plasma. Precisamente, el ambiente interestelar está dominado por el material expulsado desde las capas externas de las fuentes estelares, como nuestro Sol. El viento solar es un medio totalmente turbulento, en el que las partículas que lo conforman son cuasi no colisionales.

Para comprender los principios fundamentales de los campos físicos, de la materia y sus interacciones en el sistema complejo descrito se utilizan modelos físicos no lineales hidrodinámicos, magnetohidrodinámicos y cinéticos, en función de las escalas espacio temporales de interés.

La paralelización es la mejor (y muchas veces la única) manera para que el software que resuelve éstos modelos sea lo más eficientemente posible, permitiendo obtener resultados de manera veloz. En este sentido, desarrollar un algoritmo adaptable a la física de plasmas en diferentes escalas es crucial para mejorar el alcance teórico de estos sistemas, y dar soporte numérico a los experimentos y/o satélites involucrados en la física de plasmas.





<b>5.3 Productos esperados</b>	
a. Publicaciones científicas (obligatorio);	<input checked="" type="checkbox"/>
b. Disertación a la Comunidad Politécnica;	<input checked="" type="checkbox"/>
c. Proyecto de Titulación;	<input checked="" type="checkbox"/>
d. Tesis de Grado (maestría o doctorado);	<input type="checkbox"/>
e. Aplicación tecnológica construida o implementada;	
f. Patente presentada;	<input type="checkbox"/>
g. Perfil de proyecto de mayor impacto científico, técnico, pedagógico o de innovación.	<input type="checkbox"/>

<b>5.4 Detalle de los resultados esperados (con relación a los objetivos)</b>
a. Algoritmo PIC general. Adaptable a modelos fluidos e híbridos.
b. Código PIC paralelizado y optimizado para correr en un HPC.
c. Pruebas de estabilidad y confiabilidad del código PIC en aplicaciones fluidas.

<b>6 Descripción, metodología y cronograma de trabajo</b>
<b>6.1 Descripción, metodología y diseño del proyecto (Máximo dos carillas)</b>
<p>La descripción clásica o relativista del mundo natural se basa en la descripción de la interacción de los elementos de materia con campos [8]. En el caso de un plasma, el sistema está compuesto por partículas cargadas que interactúan a través de campos eléctricos y magnéticos [2].</p> <p>El método más ampliamente usado para describir la dinámica cinética de un sistema de plasma es el método particle-in-cell (PIC), que es esencialmente un método de Monte-Carlo [2,3]. Las simulaciones PIC siguen la dinámica de las partículas usando una aproximación Lagrangiana, es decir, integrando numéricamente la ecuación de movimiento para un gran número de macro partículas, bajo los efectos de campos electromagnéticos externos y/o auto-consistentes (aquellos creados por las propias partículas) [10].</p> <p>El punto crucial de la derivación del método PIC es la consideración de cómo las fuentes en las ecuaciones de Maxwell deben ser calculadas [6]. En principio, dado que el sistema está conformado por partículas de tamaño infinitesimal, las fuentes de las ecuaciones de Maxwell son distribuciones de las contribuciones de cada partícula. Si tomamos un cubo convencional de lados iguales a la longitud de Debye <math>\lambda_D</math>, el número de partículas presentes es <math>N_D = n \lambda_D^3</math>, donde <math>n</math> es la densidad del plasma. Un sistema es considerado acoplado débilmente cuando <math>N_D</math> es grande, y fuertemente acoplado cuando <math>N_D</math> es pequeño [1].</p>



Básicamente, una simulación computacional podría describir la interacción de las partículas de un sistema siguiendo individualmente a cada una de ellas [5]. El formalismo particle-particle (PP) describe el movimiento de  $N$  partículas al evolucionar las ecuaciones de Newton para cada una de las partículas tomando como la fuerza que actúa sobre ellas a la contribución de todas las demás partículas del sistema [4]. Para sistemas fuertemente acoplados, el marco PP es factible y forma la base del método de la dinámica molecular, empleado en la materia condensada y en los estudios biomoleculares. En el caso de los sistemas débilmente acoplados, este formalismo se vuelve obsoleto por la cantidad de partículas y consecuentemente por la cantidad de interacciones. Entonces, el uso de partículas computacionales de tamaño finito reduce el número de interacciones entre partículas.

En el método PIC, también llamado como particle-mesh (PM), el sistema se representa por un número pequeño de partículas computacionales de tamaño finito, todas interaccionando a través del potencial correcto a distancias superiores a la distancia de solapamiento, pero corrigiendo el efecto de pocas partículas a cortas distancias por el reducido potencial de interacción [6, 7]. El resultado es que las fluctuaciones del campo eléctrico en el sistema son adecuadamente bajas, como deberían ser en un sistema débilmente acoplado. Así mismo, la trayectoria de las partículas son coherentes con el sistema real, no porque cada partícula está rodeada por un gran número de partículas, sino porque sus vecinos cercanos producen interacciones débiles. El efecto colectivo es todavía correcto debido a que las interacciones de largo alcance no se modifican y reproduce correctamente el sistema físico.

Numéricamente, el método PIC puede ser visto como un modelo de elementos finitos, pero con elementos finitos que se mueven y solapan. La formulación matemática del método PIC es obtenida al asumir que la función de distribución de cada especie de partícula está dada por la superposición de varios elementos, llamados partículas computacionales o súperpartículas [9]. El método PIC se basa fundamentalmente en asignar cada partícula computacional una forma funcional específica para su distribución, una forma funcional con un número de parámetros libres cuya evolución temporal determinará la solución numérica de la ecuación de Vlasov. Entonces, los parámetros libres detallados tomarán el significado físico de posición y velocidad de la partícula computacional [2, 9].

De esta manera, una ventaja crucial del método PIC sería que sus ecuaciones de evolución se asemejan a las mismas ecuaciones de Newton para partículas físicas regulares. La diferencia entre estos dos modelos es que el campo es calculado como el promedio sobre las partículas computacionales. Complementariamente, la solución de las ecuaciones de campo puede ser encontrada a través de una amplia variedad de métodos; en la mayoría de los métodos PIC existentes se usan diferencias finitas o volúmenes finitos. Uno de los hitos del presente proyecto será la elección de uno de estos métodos para la resolución de las ecuaciones de campos electromagnéticos.





Basados en la descripción previa, el algoritmo descrito en [1,2,10] será reescrito en diferencias finitas, para su evolución espacial, y espacio de Fourier para su evolución temporal. A continuación, se desarrollara el análisis de estabilidad para determinar las condiciones de estabilidad numérica Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

El código correspondiente será escrito por partes en Fortran, e implementado en las estaciones de trabajo personales. Así, se puede comprobar que las condiciones CFL son respetadas y el dan estabilidad al código. Con el correcto funcionamiento del código para bajas resoluciones, se necesitara paralelizarlo para enfrentar fenomenología descrita anteriormente. El proceso de paralelizacion se lo debe realizar en función del equipo de HPC. Este paso se lo realizara en colaboración con el equipo técnico del consorcio CEDIA y el centro MODEMAT de la EPN.

#### Bibliografía

1. Barnes J. and Hut P. (1986). A herarchical  $O(N \log N)$  force-calculation algorithm. *Nature*, 324, 4446-4449. doi:10.1038/324446a0
2. Birdsall C.K., Langdon A.B. (1985). *Plasma Physics Via Computer Simulation*. Singapur. (McGraw-Hill Book Co.).
3. Dawson J.M. (1983). Particle simulation of plasmas. *Rev. Mod. Phys.*, 55, 403-447. doi:http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.55.403
4. Dieckmann M. E., Eliasson B., Stathopoulos A., and Ynnerman A. (2004). Connecting Shock Velocities to Electron-Injection Mechanisms. *Phys. Rev. Lett.* 92, 065006.
5. Frenkel D. and Smit B. (2002). *Understanding Molecular Simulation*. San Diego. (Academic Press).
6. Germaschewskia K., Fox W., Abbott S., Ahmadi N., Maynard K., Wang L., Ruhl H., Bhattacharjee A. (2016). The Plasma Simulation Code: A modern particle-in-cell code with patch-based load-balancing. *Journal of Computational Physics*, 318, 305-326.
7. Hockney R.W. and Eastwood J.W. (1981). *Computer simulation using particles*. New York. (McGraw-Hill).
8. Krall N. and Trivelpiece A.W. (1973). *Principles of plasma physics*. United States of America. (McGraw-Hill).
9. Lapenta G. Brackbill J.U. and Ricci P. (2006). Kinetic approach to microscopic-macroscopic coupling in space and laboratory plasmas. *Physics of plasmas*. doi:http://dx.doi.org/10.1063/1.2173623
10. Valentini F., Trávníček P., Califano F., Hellinger P. and Mangeney A., (2007). A hybrid-Vlasov model based on the current advance method for the simulation of collisionless magnetized plasma. *Journal of Computational Physics*, 225, 753-770.



**6.2 Cronograma de trabajo anual:**

Actividad	Primer Año						TOTAL
	Porcentaje de avance por mes						
	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12	
Desarrollo del algoritmo PIC	10	10					20
Paralelización del algoritmo		10	10	10			30
Adaptación fluida				10	10	10	30
Pruebas de efectividad					10	10	20
<b>TOTAL</b>							100

**7 Fechas de inicio y fin**

Inicio: 01/10/2016

Fin: 30/09/2017

**8 Tiempo de dedicación de docentes, infraestructura, equipos y fondos adicionales.**

**8.1 Tiempo máximo de dedicación semestral del Director del proyecto, de los docentes participantes y otros colaboradores.**

	<i>Tiempo de dedicación</i>
Christian L. Vásquez, PhD (Director)	16
Ramón Xulvi, PhD (Profesor colaborador)	8

*El tiempo de dedicación máximo será de acuerdo al tipo de proyecto:*

<i>Proyecto</i>	<i>Director</i>	<i>Colaboradores</i>
<i>PII y PIS</i>	<i>16 HSS</i>	<i>8 HSS</i>
<i>PIJ y PIMI</i>	<i>20 HSS</i>	<i>10 HSS</i>

**8.2 Infraestructura y equipos**

- 2 computadores personales de escritorio.

**8.3 Breve justificación del equipo requerido**

- Justificar la infraestructura y equipos solicitados para la ejecución del proyecto

**8.4 Fondos Adicionales**


- Propuesta de proyecto "Estudio numérico de plasmas astrofísicos y atmosféricos: Aplicaciones al clima terrestre, espacial, e interestelar." en el consorcio CEDIA.





**ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL**  
VICERECTORADO DE INVESTIGACIÓN Y PROYECCIÓN SOCIAL

9	<b>Presupuesto estimado para la ejecución del presente proyecto (anual)</b>		
	• <i>No aplica</i>		
	<b><u>Primer Año</u></b>		
	Lista de ítems	Cantidad solicitada (US \$)	Porcentaje (%)
	1. Contratación Servicios Personales por Contrato <i>Ayudantes de Investigación</i>		
	<b>Subtotal</b>		
	2. Maquinaria y Equipos		
	<b>Subtotal</b>		
	3. Reactivos y materiales de laboratorio		
	<b>Subtotal</b>		
	4. Literatura especializada		
	<b>Subtotal</b>		
	5. Viajes técnicos y de muestreo		
	<b>Subtotal</b>		
6. Presentación de ponencias en congresos internacionales y publicaciones			
<b>Subtotal</b>			
<b>TOTAL PRESUPUESTO</b>	X.XXX,00 + IVA	100	

10	<b>Lugar y Fecha / Firma del Director del Proyecto</b>	
	<p align="center">Quito, 9 de septiembre del 2016</p> <p>Nombre: Christian Leonardo Vásquez Vega CC: 1717320723</p>	 Firma del Director

<b>DECLARACION DEL JEFE DE DEPARTAMENTO</b>	
<p>Esta propuesta ha sido aprobada por el Consejo del Departamento/Instituto <u>Física</u> al que pertenece el Director del Proyecto, en Sesión del <u>24 de septiembre del 2016</u> mediante Resolución No. <u>3</u> y las instalaciones, incluyendo personal, edificios, equipo y recursos financieros están a disposición del aplicante de acuerdo con las especificaciones que se encuentran en esta aplicación.</p>	
 JEFE DEL DEPARTAMENTO/INSTITUTO Nombre: <u>Dr. César Augusto Cortés</u> CC: <u>1102550801</u>	 <u>Quito, 24 de septiembre de 2016</u> Lugar y fecha