

**Universidade de Brasília - UnB**  
**Instituto de Física**  
**Programa de Pós – Graduação em Física**

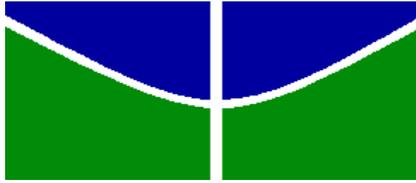
**Dissertação de Mestrado**

**Simulações *Particle-in-Cell* da interação entre fótons e  
plasmas de lítio**

Ana Virgínia Passos Abreu

Brasília

Agosto de 2015.



**Universidade de Brasília - UnB**

**Instituto de Física**

**Programa de Pós – Graduação em Física**

Simulações *Particle-in-Cell* da interação entre fótons e plasmas  
de lítio

---

*Dissertação submetida ao  
Programa de Pós Graduação em  
Física da Universidade de Brasília,  
como requisito para obtenção do  
Título de Mestre em Física.*

---

Autora: Ana Virgínia Passos Abreu

Orientador: Dr. Antonio Luciano de A. Fonseca

Co- Orientador: Dr. Ivan Soares Ferreira

À Deus, minha família e aos meus mestres.

## **Agradecimentos**

Agradeço primeiramente a Deus que com muita fé e luta proporcionou-me esta grande vitória e oportunidade até aqui. À minha amada família, meu pai, Darcy de Abreu Neto, minha mãe, Durcilene de Oliveira Passos que sempre lutaram e dedicaram-se a tantas batalhas para proporcionar este dia.

Ao meu grande mestre Dr. Antonio Luciano que com paciência e orientação desde o início aceitou ser meu orientador e colaborou que este trabalho fosse concluído.

Ao também meu grande mestre Dr. Ivan Ferreira, professor do Instituto de Física da UnB que teve suma importância na realização deste contribuindo na orientação e demais esclarecimentos.

Ao meu grande amigo e irmão Stefano Finazo pela orientação, paciência e colaboração e seu grande amor à ciência.

Ao meu grande amigo Gabriel Favero que nestes curtos dois anos colaborou de maneira importante para o cumprimento de cada etapa alcançada.

Agradeço a banca (Dr. Bernhard Georg Enders e Dr. Luís Antônio Ribeiro Júnior) que desde já aceitou participar deste momento tão importante.

Deixo aqui o agradecimento de forma geral aos grandes amigos que aqui fiz, Oscar Araújo, Carlos Xavier, Igor Melo, Tamires, Arthur, e ao meu namorado, Raphael E. D' Ávila pela paciência e apoio no fim desta jornada.

## Resumo

O presente trabalho consistiu na elaboração de um modelo de aceleradores de partículas super potentes que são capazes de atingir campos elétricos da ordem 1 GeV/m, ou seja, capazes de ultrapassar o limite de disrupção existentes nos aceleradores de partículas atuais, com isso será possível acelerar partículas utilizando curtas distâncias, além de distâncias quilométricas. Para a realização deste trabalho, utilizamos o código computacional *PIC (Particle-in-cell)* que consiste num modelo de partículas em células, onde cada “*macro partícula*” representa as milhares de partículas existentes no sistema. Para desenvolver o trabalho fizemos modificações no código e utilizamos um plasma de lítio no qual um feixe de elétrons é inserido, criando uma onda de choque e acelerando as partículas.

Obtemos um modelo semelhante ao utilizado no Stanford Linear Accelerator Center, no qual inserimos feixes de elétrons com uma energia de 30 GeV, analisamos a eficiência do acelerador a plasma, a importância no desenvolvimento na ciência e as instabilidades geradas abordando o amortecimento de Landau e as instabilidades de Farley-Buneman.

**Palavras chave:** PIC, teoria cinética, instabilidade, Landau, macro-partícula, aceleradores.

## **Abstract**

This work consisted of developing a model of super powerful particle accelerators that are able to achieve electric fields of order 1 GeV / m, ie, able to overcome the existing disruption limit on current particle accelerators, with this will be possible particle acceleration using short distances, and the kilometric distances. To carry out this study, we used the computer code PIC (Particle-in-cell) consisting of a particle model into cells, where each "macro particle" is the thousands of particles in the system. To develop the work done modifications code and use a plasma lithium on which an electron beam is inserted, creating a shock wave and accelerating the particles.

We obtain a similar model to that employed in Staford Linear Accelerator Center, in which insert electron beams with an energy of 30 GeV, we analyzed the accelerator efficiency of the plasma, the importance in the development of science and instabilities generated by addressing the damping Landau and instabilities Farley-Buneman.

Keywords: PIC, kinetic theory, instability, Landau, macro-particle accelerators.

# Sumário

Lista de Figuras	Erro! Indicador não definido.
Introdução	10
Capítulo 1: Embasamento teórico	11
1.1 Conceitos de plasma	11
<b>1.2 Frequência de Plasma – elétron</b>	12
Capítulo 2	16
Teoria Cinética	16
Introdução	16
2.1 Equações do Sistema	17
2.1.1 Equações das partículas	17
2.1.2 Equações dos campos	17
2.2 Densidade numérica e velocidade média	18
2.3 Equação de Boltzmann	18
2.4 Equação de Vlasov	21
Capítulo 3	24
Amortecimento de Landau	24
Introdução	24
3.1 Oscilações eletrostáticas do plasma eletrônico com uma dada função de distribuição inicial	24
Capítulo 4	33
Simulação do tipo partículas em Células	33
Introdução	33
4.1 Procedimento para simulação cinética via partículas	33
4.2 Paralelização de Códigos PIC	37
Capítulo 5	41
Resultados e Discussões	41
Introdução	41
5.1 Modelo E- 157 utilizando plasma de Lítio	41
Capítulo 6	48
Conclusões	48
Referências Bibliográficas	49

## Lista de Figuras

<p><b>Figura 1.1 :</b> Acelerador laser- plasma. O laser (laranja) propaga-se para a direita através de um plasma de elétrons (cinza). A sua força ponderomotriz afasta os elétrons e cria uma onda caracterizada por fortes campos elétricos. Elétrons “surfam” (azul) a onda e ganham energia de forma contínua. ....</p>	15
<p><b>Figura 2.</b> Partículas na ausência de colisões num instante <math>t</math> dentro do elemento de volume <math>d^3r d^3v</math> sobre <math>(\mathbf{r}, \mathbf{v})</math>, e depois em um intervalo de tempo <math>dt</math> ocupa um novo elemento de volume <math>d^3r' d^3v'</math> sobre <math>(\mathbf{r}', \mathbf{v}')</math>. ....</p>	21
<p><b>Figura 3.1:</b> Contorno de integração para a inversa da transformada de Laplace <math>\phi_{1k}(t)</math>. A constante <math>p_0</math> é escolhida de modo que os pólos de <math>\phi_{1p}</math> estão à esquerda do caminho de integração. ....</p>	27
<p><b>Figura 3.2:</b> Contornos de Landau para o cálculo da integral (3.18) para três valores diferentes de <math>\text{Re}(p)</math>. O conjunto de contorno garante que a integral em <math>u</math> é uma função contínua de <math>p</math>. .29</p>	.29
<p><b>Figura 3.3:</b> Contorno deformado para o cálculo de <math>\phi_{1k}(t)</math> no limite <math>t \gg 1</math> ..... 31</p>	31
<p><b>3.4:</b> Contorno de integração <math>u = \frac{ip_k}{k}</math>, perto do eixo real ..... 33</p>	33
<p><b>Figura 4.1:</b> Esquema mostrando o algoritmo de uma simulação de partículas em células. ....</p>	36
<p><b>Figura 4.2:</b> Esquema do ciclo PIC/ MMC. ....</p>	37
<p><b>Figura 4.3:</b> Esquema do método leaprog. ....</p>	38
<p><b>Figura 4.3:</b> Grade numérica onde as super-partículas interagem entre si através de campos elétricos e campos magnéticos (símbolos <math>\times</math> e <math>\Delta</math>). ....</p>	39
<p><b>Figura 4.4:</b> Decomposição de domínio em regiões espaciais (a) e decomposição de domínio pelo índice das partículas (b). ....</p>	41
<p><b>Figura 5.1:</b> Plasma “perturbado” por um feixe de elétrons na direção <math>z</math> com dimensão medida em metros. ....</p>	46
<p><b>Figura 5.2:</b> Velocidade radial x posição. Dispersão dos elétrons acarreta perda de energia. ....</p>	46
<p><b>Figura 5.3:</b> Campo elétrico longitudinal do pulso de elétrons. ....</p>	48
<p><b>Figura 5.4:</b> Campo elétrico na direção radial do pulso de elétrons. ....</p>	49

**Figura 5.5:** Concentração de elétrons. Feixes de elétrons são distorcidos e tem velocidade radial, gera instabilidade no plasma, promovendo ondas e a energia das ondas do plasma é convertida em energia cinética. .... 50

**Figura 5.6:** Energia cinética tem comprimento finito. Transferência da energia da onda para energia cinética das partículas se dá através do mecanismo de Landau. ....51

# Introdução

O plasma é um gás quase neutro composto por elétrons, íons positivos e partículas eletricamente neutras que exibem comportamento coletivo. O estudo de plasma vem ganhando grande interesse devido ao grande número de aplicações científicas e industriais que podemos obter através do melhor conhecimento dos fenômenos relacionados ao mesmo. A metodologia Particle-in-Cell (PIC) é uma das principais abordagens utilizadas para a simulação de plasmas por ser bastante versátil e permitir o tratamento de diversos fenômenos peculiares a situações específicas de plasmas, como por exemplo, processos colisionais. Nos modelos PIC o plasma é simulado por um grande número de partículas de simulação que o compõem, cujos movimentos são calculados individualmente após determinar-se a força que atua em cada partícula. Em nosso trabalho desenvolvemos um modelo de novos aceleradores de partículas utilizando plasma, inserimos um feixe de elétrons num plasma de lítio no qual foram submetidos a um campo elétrico da ordem 1GV/m em uma pequena região, com isso observamos a interação desse campo na geração de altas energias criadas pela aceleração de elétrons no plasma.

Primeiramente apresentamos a abordagem teórica e características dos plasmas e a ideia de trabalharmos com aceleradores de partículas utilizando plasmas.

No capítulo 2, fizemos uma introdução à teoria cinética de plasmas, estudando: abordagem estatística das equações do plasma, o tratamento a ser dado às funções de correlação que aparecem nessa abordagem, e o sistema de equações Vlasov – Maxwell.

No capítulo 3 estudamos o amortecimento de Landau ao tratar o sistema de Vlasov – Maxwell como um problema de valor inicial, incluindo uma discussão sobre a resolução de integrais no plano complexo, com polos no denominador, e a solução da relação de dispersão para encontrar os modos normais de oscilação no plasma.

Após a análise matemática do sistema, no capítulo 4 analisamos o modelo computacional, explicando passo a passo a matriz de resolução cinética. O código PIC na simulação via partículas, mostrando que as simulações cinéticas têm sido aplicadas com sucesso no tratamento de problemas de física básica, nos quais a função de distribuição das partículas desvia-se consideravelmente da distribuição Maxwelliana, quando ocorre aquecimento estocástico, aprisionamento de partículas ou ressonância onda- partículas. São também apresentados o diagrama com os passos básicos na configuração de uma simulação cinética.

Por último no capítulo 5, analisamos os resultados encontrados, como análise do campo elétrico na direção z e radial, propagação dos feixes e comportamento dos elétrons e íons.

Por fim, apresentamos as conclusões aos principais resultados obtidos no capítulo 5.

# Capítulo 1

## Embasamento teórico

### 1.1 Conceitos de plasma

O estudo de plasmas trouxe um grande avanço na ciência com aplicações científicas e industriais, podemos citar aplicações de plasmas que abrangem desenvolvimento de dispositivos que utilizam laser, tecnologias de processamento de materiais, propulsão iônica, fusão nuclear controlada, redução de arrasto aerodinâmico, dentre outras. O estado de plasma caracteriza-se pelo equilíbrio entre os potenciais que governam o comportamento coletivo e oscilatório das partículas, os potenciais estudados são de Coulomb e termocinéticos das partículas eletricamente carregadas que compõem o plasma. Em suma, o plasma é uma substância macroscopicamente neutra que contém muitos elétrons livres e átomos e moléculas ionizados que interagem coletivamente devido a ação do campo elétrico proveniente das cargas das partículas, o qual o campo elétrico é chamado de auto consistente. O termo “plasma” foi adotado, para descrever uma coleção de partículas carregadas por Tonks e Langmuir em estudos de oscilações em descargas elétricas.

O plasma é mais geralmente considerado como o quarto estado da matéria [19]. Tal visão é uma conclusão natural dos seguintes fatos: se adicionarmos calor ao sólido, isto resultará numa transição de fase para um novo estado, o líquido. Adicionando uma quantidade de calor maior ao líquido, este sofrerá uma transição de fase para o estado gasoso. Finalmente, se mais calor é adicionado, o resultado será uma ionização da matéria, ou seja, o estado de plasma.

O desafio da física de plasmas decorre de que muitas de suas propriedades, resultantes da interação coulombiana, são oriundas de movimentos coletivos e envolvem interações simultâneas de muitas partículas. Por simplicidade, o plasma pode ser considerado uma coleção de prótons e elétrons numa densidade suficientemente baixa, onde interações binárias (curto alcance) são desprezíveis.

A amplitude das oscilações dos elétrons em torno dos íons está relacionada a um parâmetro, para a caracterização do plasma, o chamado comprimento de Debye  $\lambda_D$ , dada por:

$$\lambda_D = \left( \frac{\epsilon_0 K T}{n_e e^2} \right)^{1/2}, \quad (1.1)$$

onde  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica do meio,  $K$  é a constante de Boltzman,  $T$  é a temperatura,  $n_e$  é a densidade de elétrons e  $e$  é a carga elementar do elétron. Em outras palavras, se definirmos uma esfera de Debye, isto é, uma esfera com raio igual a  $\lambda_D$ , em torno de uma partícula carregada, então a contribuição individual dos campos elétricos produzidos por partículas carregadas que estiverem fora da esfera de Debye é muito pouco expressiva (negligenciável) no campo elétrico resultante sobre

a partícula no centro da esfera de Debye, conforme demonstrado teoricamente em Kruer [26]. O efeito da blindagem dos campos eletrostáticos a partir de uma distância da ordem de  $\lambda_D$ , também chamada blindagem de Debye, é uma característica de todos os plasmas e não ocorre em todos os meios com partículas carregadas. Este fenômeno se deve à forma com que as partículas carregadas do plasma se organizam em resposta aos efeitos coletivos. Um requisito para ocorrência de plasma pode ser estabelecido aqui: as dimensões físicas do sistema devem ser grandes comparadas ao parâmetro de Debye, já que deve haver espaço físico suficiente para que os efeitos de blindagem coletiva de Debye possam ser observados. Caso contrário, simplesmente não haverá espaço físico suficiente para o efeito de blindagem e as partículas carregadas não apresentarão comportamento de plasma. A seguinte relação estabelece um primeiro critério para a ocorrência de plasma:  $L \gg \lambda_D$ , onde L é um fator de escala das dimensões do sistema de partículas.

O comprimento de Debye também pode ser entendido como a distância sobre a qual perturbações da neutralidade macroscópica (causadas pela energia cinética das partículas) podem ocorrer, originando flutuações de potencial elétrico, também conhecidas na literatura especializada como flutuações de microcampo. Essas flutuações de potencial elétrico dão origem a fenômenos ondulatórios em plasma, que nada mais são que a transformação periódica de energia termo-cinética em energia potencial elétrica e vice-versa, como será discutido adiante. Desde que o efeito de blindagem é resultado da interação coletiva das partículas dentro de uma esfera de Debye, o número de elétrons dentro de uma esfera de Debye deve ser suficientemente grande, ou equivalentemente, a distância média entre elétrons ( $\approx n_e^{-1/3}$ ) dentro da esfera de Debye deve ser muito pequena comparada ao comprimento de Debye, isto é,

$$n_e \lambda_D^3 \gg 1, \quad (1.2)$$

que representa um segundo critério para a ocorrência de um plasma. Quando o número de elétrons dentro de uma esfera de Debye é muito grande, pode-se demonstrar que os efeitos colisionais podem ser desprezados [27], e o plasma é dito não colisional. O número de elétrons dentro de uma esfera de Debye é dado por:

$$N_D = \frac{4}{3} \pi \lambda_D^3 n_e. \quad (1.3)$$

Um terceiro critério a ser levado em conta é a neutralidade macroscópica de carga elétrica, uma vez satisfeitas as condições anteriores dada pelas equações (1.1) e (1.3).

## 1.2 Frequência de Plasma – elétron

Devido à estabilidade da neutralidade elétrica, quando um plasma é perturbado os campos resultantes da separação de partículas carregadas dão origem a movimentos coletivos de partículas que tendem a recuperar a neutralidade de carga original. Estes movimentos coletivos são caracterizados por uma frequência chamada de frequência do plasma. Os elétrons, partículas mais

leves, oscilam coletivamente em torno de íons mais pesados e à medida que se afastam, a força restauradora é fornecida pela interação de Coulomb íon-elétron, acelerando rapidamente os elétrons para recuperar a neutralidade de carga (no espaço de cargas considerado). Entretanto, devido à sua inércia, os elétrons avançam da posição de equilíbrio, e então é originado um campo elétrico restaurador na direção contrária. Estas oscilações coletivas rápidas (de alta frequência) de elétrons em torno de íons mais pesados repetem-se periodicamente e são oriundos da transformação contínua de energia termocinética em energia potencial elétrica e vice-versa. A frequência angular destas oscilações coletivas de nuvens de elétrons é dada por:

$$\omega_{pe} = \left( \frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0} \right)^{1/2}, \quad (1.4)$$

normalmente, esta é a mais alta frequência em um plasma. Isto deve ser levado em conta no dimensionamento do incremento de tempo que deverá ser usado na integração das equações de movimento. Colisões entre elétrons e partículas neutras tendem a reduzir estas oscilações coletivas e gradualmente diminuir sua amplitude. Quando a frequência de colisão elétron-partícula neutra é relativamente alta, os elétrons deixam de se comportar de forma independente (devido às frequentes colisões) e são forçados a entrarem em equilíbrio termodinâmico com as partículas neutras; neste caso, o meio pode ser tratado como um gás neutro. Assim, pode-se dizer que a ocorrência de um plasma é caracterizada por uma frequência de colisão elétron-partícula neutra menor que a frequência plasma-elétron.

### 1.3 Aceleradores de partículas utilizando plasmas

Os aceleradores de partículas são usados em diversas áreas da ciência e da tecnologia, onde partículas são aceleradas a alta velocidade para estudo e compreensão da física fundamental, aplicações na medicina, química, ciência dos materiais e biologia, um exemplo de aceleradores é LHC (The Large Hadron Collider) no CERN (European Organization for Nuclear Research). Atualmente utilizam intensa radiação de micro-ondas para gerar campos elétricos em cavidades de micro-ondas com dimensões aproximadamente de 1 a 50 cm. A aceleração de partículas a altíssimas velocidades leva a formação de campos elétricos gigantes ocasionando um limite de ruptura, valor a partir do qual os campos elétricos nas paredes das cavidades são suficientes para arrancar os elétrons do material e destruir a estrutura do acelerador, razão pela qual se utiliza aceleradores da ordem de quilômetros. Este limite é da ordem de 50 milhões de  $V/m$ , o qual impõe limitações ao valor máximo do campo elétrico que esta tecnologia pode atingir.

Os avanços da ciência contribuíram para um nova forma de aceleradores com muito mais eficiência e baixo custo, é o caso dos aceleradores baseados em plasma nos quais sustentam ondas de plasma de elétrons (OPE) com campos elétricos longitudinais da ordem do campo elétrico de ruptura da onda não-relativística. Podemos analisar este campo usando  $E_0 = \frac{cm_e \omega_p}{e}$ , onde

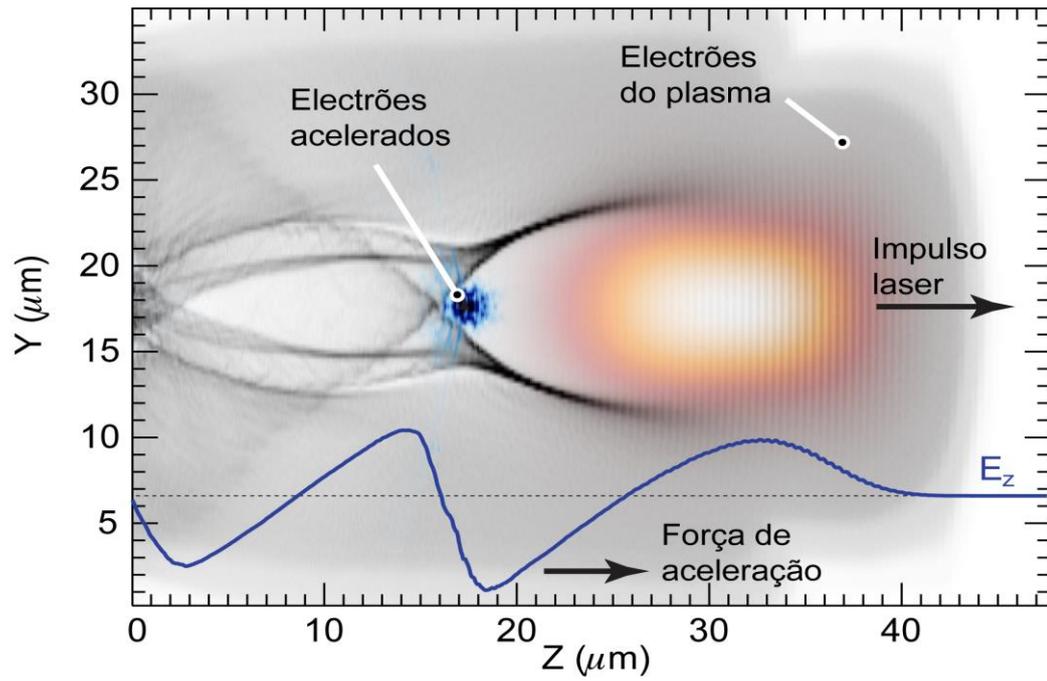
$\omega_p = \left( \frac{4\pi n_e e^2}{m_e} \right)^{1/2}$  é a frequência do plasma e  $n_e$  é a densidade do elétron (número de elétrons por unidade de volume). Para  $n_e = 10^{-18} \text{ cm}^{-3}$ , o campo elétrico

$E_0 \cong 100 \text{ GV/m}$  com velocidade de fase perto da velocidade da luz, ocasionando um maior avanço nos aceleradores, maior que os convencionais.

Para diminuir o comprimento dos aceleradores e vencer esse limite de ruptura o plasma surge como uma boa forma de acelerar partículas, obtendo campos elétricos três ordens de grandeza acima de 50 milhões  $V/m$ . Devido ao comportamento coletivo das partículas que compõe o plasma, podem sustentar campos elétricos extremamente elevados sem alterar suas propriedades fundamentais.

Em 1979, T. Tajima e J. Dawson [27] propuseram em seu artigo publicado em *Physical Review Letters*, usar impulsos laser intensos para criar ondas de plasma para aceleração de partículas - Acelerador Laser-Plasma (ALP), como mostrado na figura (1.1). A Força Ponderomotriz (pressão da radiação que cria as ondas) cria o impulso que o laser exerce sobre os elétrons do plasma, que tem massa mais leve, motivo este de maior movimento.

Experiências realizadas em laboratório comprovam a eficiência de um ALP produzir feixes de elétrons de altas energias a escala de centímetros, que é uma das vertentes pesquisadas pelos cientistas, e a outra consiste no estudo numérico dos ALP, para elaboração de desenhos ideias para experiências, utilizam os métodos computacionais para analisar as configurações experimentais. A modelização computacional de um plasma que exploramos foi o método partículas em células (PIC-*Particle-in-Cell*), que consiste num método cinético. Neste método as partículas reais são agrupadas em "super- partículas", cada uma representa as milhares de partículas reais, que interagem entre si através de uma grelha de pontos onde são guardados os campos elétricos e magnéticos, reduzindo o número de operações para um valor linearmente proporcional ao número de partículas. A evolução do sistema se dá através das equações de Maxwell (descreve como cargas elétricas e correntes elétricas agem como fontes dos campos elétricos e magnético, como mostradas no próximo capítulo) que são resolvidas na grade usando as correntes elétricas produzidas pelas partículas. Após o avanço temporal nos campos, os momentos e posições das super-partículas são atualizados através da força de Lorentz.



**Figura 1.1** : Acelerador laser- plasma. O laser (laranja) propaga-se para a direita através de um plasma de elétrons (cinza). A sua força ponderomotriz afasta os elétrons e cria uma onda caracterizada por fortes campos elétricos. Elétrons “surfam” (azul) a onda e ganham energia de forma contínua.

Fonte: Instituto Superior Técnico – Instituto de Plasmas e Fusão Nuclear.

S. Martins; R Fonseca; L. Silva.

## Capítulo 2

# Teoria Cinética

### Introdução

Neste capítulo utilizamos a mecânica estatística para analisar o plasma, apresentando os elementos básicos da teoria cinética.

A teoria cinética é baseada nos conceitos originais para descrever a dinâmica microscópica do sistema, modelar a evolução de um gás diluído de partículas e calcular as funções de distribuição do sistema, que podem ser usadas para calcular médias e dispersões macroscópicas.

Utilizamos a função de distribuição para fazer análise física do plasma, pois a mesma concentra toda informação estatística. Conhecida a função de distribuição, as variáveis macroscópicas de interesse físico, necessárias para tal descrição do comportamento do plasma, podem ser calculadas. A função de distribuição satisfaz a chamada equação de Boltzmann.

A função de distribuição  $N_\alpha$  é definida como uma função da posição  $x$ , da velocidade  $v$  e do tempo  $t$ ,  $N_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ .

Considere um sistema que contém duas espécies de partículas, elétrons e íons, cada uma com  $N_0$  partículas. Para descrever melhor o sistema definimos uma função  $N_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  que contém toda a informação do sistema, a função descreve uma coleção de partículas pontuais da espécie  $\alpha$ , é:

$$\begin{aligned} N_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) &= \sum_{i=1}^{N_0} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha i}(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\alpha i}(t)) \\ &= \sum_{i=1}^{N_0} \delta[\mathbf{X} - \mathbf{X}_{\alpha i}(t)] \quad , \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde  $\mathbf{X} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ . O número total de partículas num instante  $t$  é dado por.

$$n_\alpha(t) = \int d^3x d^3v N_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad . \tag{2.2}$$

$n_\alpha(t)$  denota o número de partículas do tipo  $\alpha$  dentro do elemento de volume  $d^3rd^3v$  em torno do espaço, num instante  $t$ .

## 2.1 Equações do Sistema

Para descrever o movimento das partículas, é necessário saber a dinâmica microscópica para usar as equações de Boltzmann, tais equações dependem de campos, logo descreveremos também as equações de campo.

### 2.1.1 Equações das partículas

As posições exatas e a velocidade das partículas são determinadas pela sua condição de inicial porque  $\mathbf{X}_i(t)$ , satisfaz a equação:

$$\dot{\mathbf{X}}_i(t) = \mathbf{V}_i(t) \quad , \quad (2.3)$$

As equações de movimento das partículas são dadas pela força de Lorentz.

$$m_\alpha \dot{\mathbf{V}}_i(t) = q_\alpha \mathbf{E}[\mathbf{X}_i(t), t] + \frac{q_\alpha}{c} \mathbf{V}_i(t) \times \mathbf{B}[\mathbf{X}_i(t), t] \quad . \quad (2.4)$$

### 2.1.2 Equações dos campos

Os campos que satisfazem as equações de Maxwell, podem então ser escritos.

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = 4\pi\rho(\mathbf{x}, t) \quad (2.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad (2.7)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \quad . \quad (2.8)$$

A densidade de carga e a densidade de corrente são, respectivamente,

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i q_\alpha \int N_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) dv \quad (2.9)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \sum_i q_\alpha \int v N_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) dv \quad . \quad (2.10)$$

## 2.2 Densidade numérica e velocidade média

Definimos uma nova função que contenha a informação estatística do sistema. A função de distribuição no espaço de fase é definida por,

$$f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \frac{d^6 \eta_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{d^3 r d^3 v}. \quad (2.11)$$

O número de densidade  $n_\alpha(\mathbf{r}, t)$ , é definido como sendo uma variável macroscópica no espaço de configuração, com número de partículas do tipo  $\alpha$ , por unidade de volume, independentemente da velocidade, definida como:

$$n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{d^3 r} \int_v d^6 \eta_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.12)$$

usando a definição de (2.11), obtemos,

$$n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int_v f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v. \quad (2.13)$$

A velocidade média  $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r}, t)$  é definida como a velocidade de escoamento macroscópico das partículas do tipo  $\alpha$  na vizinhança do vetor posição  $\mathbf{r}$  num instante  $t$ .

$$\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n_\alpha(\mathbf{r}, t) d^3 r} \int_v \mathbf{v} d^6 \eta_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (2.14)$$

usando a definição de (2.10), obtemos:

$$\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{n_\alpha(\mathbf{r}, t)} \int_v \mathbf{v} f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v. \quad (2.15)$$

## 2.3 Equação de Boltzmann

Um dos problemas iniciais da teoria cinética consiste em determinar a função de distribuição para um dado sistema. A equação diferencial que governa a variação temporal e espacial da função de distribuição sob dadas condições, geralmente conhecidas, é a equação de Boltzmann [19].

De (2.10), temos:

$$d^6 \eta_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 r d^3 v, \quad (2.16)$$

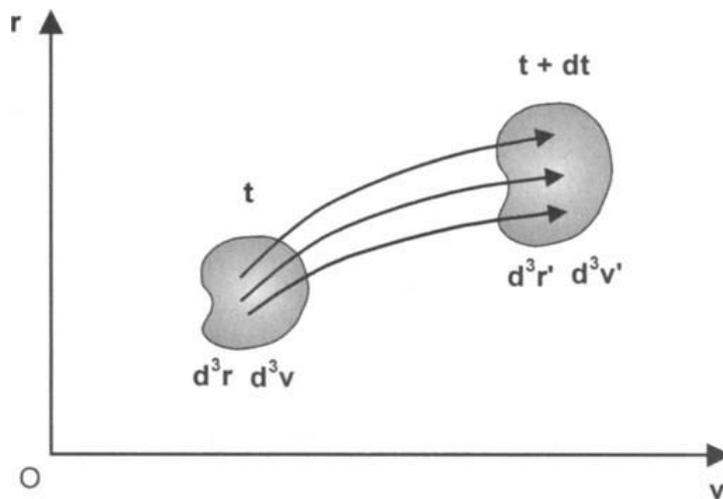
no qual representa o número de partículas do tipo  $\alpha$ , num instante  $t$ , onde estão situados dentro do elemento de volume  $d^3r d^3v$ , no espaço de fase, sobre as coordenadas  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ . Supondo que cada partícula tem uma força externa. Na ausência de interações das partículas, uma partícula do tipo  $\alpha$  com coordenadas sobre  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  no espaço de fase, num instante  $t$ , depois de um intervalo  $dt$  essa partícula está sobre a coordenada  $(\mathbf{r}', \mathbf{v}')$ , representamos por:

$$\mathbf{r}'(t+dt) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}dt \quad (2.17)$$

$$\mathbf{v}'(t+dt) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}dt, \quad (2.18)$$

onde  $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m_\alpha$  é a aceleração da partícula e  $m_\alpha$  é a massa. Portanto as partículas do tipo  $\alpha$  estão dentro do elemento de volume  $d^3r d^3v$  no espaço de fase, sobre  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  num instante  $t$ , logo após ocupará um novo elemento de volume  $d^3r' d^3v'$ , sobre  $(\mathbf{r}', \mathbf{v}')$ , como mostra figura 2. Estamos considerando as mesmas partículas em  $t$  e  $t + dt$  na ausência de colisões,

$$f_\alpha(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t+dt) d^3r' d^3v' = f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v \quad (2.19)$$



**Figura 2.** Partículas na ausência de colisões num instante  $t$  dentro do elemento de volume  $d^3r d^3v$  sobre  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ , e depois em um intervalo de tempo  $dt$  ocupa um novo elemento de volume  $d^3r' d^3v'$  sobre  $(\mathbf{r}', \mathbf{v}')$ .

Fonte: Bittencourt, J. A. "Fundamental of Plasma Physics".

A relação entre o novo elemento de volume e o inicial é dado por,

$$d^3r' d^3v' = |J| d^3r d^3v, \quad (2.20)$$

onde  $J$  representa o Jacobiano da transformação da coordenada inicial  $(\mathbf{r}, \mathbf{v})$  para a final  $(\mathbf{r}', \mathbf{v}')$ . Para tal transformação temos que  $|J| = 1$ , logo:

$$d^3r' d^3v' = d^3r d^3v, \quad (2.21)$$

resultando de (2.19),

$$\left[ f_\alpha(\mathbf{r}', \mathbf{v}', t + dt) - f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right] d^3r d^3v = 0. \quad (2.22)$$

O primeiro termo de (2.22) pode ser expandido em série de Taylor sobre  $f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$

$$\begin{aligned} \left[ f_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{v} dt, \mathbf{v} + \mathbf{a}, t + dt) \right] = f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + & \left[ \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \left( v_x \frac{\partial f_\alpha}{\partial x} + v_y \frac{\partial f_\alpha}{\partial y} + v_z \frac{\partial f_\alpha}{\partial z} \right) + \right. \\ & \left. \left( a_x \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_x} + a_y \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_y} + a_z \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_z} \right) \right] dt, \end{aligned} \quad (2.23)$$

podemos desconsiderar os termos da ordem de  $(dt)^2$ . Fazendo uso dos operadores,

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}, \quad (2.24)$$

e o operador no espaço de velocidades,

$$\nabla_v = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial v_x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial v_y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial v_z}, \quad (2.25)$$

onde obtemos para (2.23),

$$\begin{aligned} \left[ f_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{v} dt, \mathbf{v} + \mathbf{a}, t + dt) \right] = f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \\ \left[ \frac{\partial f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{a} \cdot \nabla_v f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right] dt, \end{aligned} \quad (2.26)$$

substituindo o resultado em (2.22), temos finalmente a equação de Boltzmann na ausência de colisões,

$$\frac{\partial f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0 \quad (2.27)$$

## 2.4 Equação de Vlasov

O transporte de cada espécie  $\alpha$  de partículas no plasma é governado pela variação temporal da função de distribuição, dada por

$$\frac{\partial f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left( \frac{\delta f_\alpha}{\delta t} \right)_{col}, \quad (2.28)$$

onde  $f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  define a função de distribuição das coordenadas e velocidades das partículas da espécie  $\alpha$  e  $\left( \frac{\delta f_\alpha}{\delta t} \right)_{col}$  a integral colisional. Substituindo aceleração pela força aplicada as partículas. Sendo o plasma rarefeito, as correlações entre as posições simultâneas das partículas podem ser desprezadas, e os campos elétrico e magnético são considerado como campos médios no sentido da eletrodinâmica clássica. Estes campos determinam a força de Lorentz, que podem ser substituídas na equação (2.28) em  $\mathbf{a}$ . Estamos analisando o caso onde as colisões entre as partículas não são importantes, para desprezar as colisões depende do problema específico. Em geral, a aproximação será válida quando a frequência colisional efetiva  $\nu$  for muito pequena quando comparada a frequência dos campos elétrico e magnético,  $\nu \ll \omega$ . Nessa aproximação, (2.28) se reduz a chamada equação de Vlasov

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_\alpha + \frac{1}{m_\alpha} \left[ \mathbf{F}_{ext} + q_\alpha \left( \frac{\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}}{c} \right) \right] \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_\alpha = 0. \quad (2.29)$$

Os campos que aparecem na equação de Vlasov são campos médios. Equações para os campos médios podem ser obtidas fazendo a média sobre as equações para os campos microscópicos. Os campos  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  satisfazem as equações de Maxwell.

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \sum_\alpha q_\alpha \int f_\alpha d^3v \quad (2.30)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \sum_\alpha q_\alpha \int \mathbf{v} f_\alpha d^3v \quad (2.31)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.32)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (2.33)$$

De forma técnica, as equações de Maxwell e Vlasov descrevem o estado estacionário do plasma, bem como ondas e outras instabilidades com curta escala de tempo. Todas as propriedades estão diretamente conectadas com a função de distribuição  $f_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ .

Como os valores de  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  dependem da função de distribuição, a equação de Vlasov (2.29) é uma equação integro-diferencial não-linear para  $f_\alpha$ . No tratamento usual de instabilidades, utiliza-se uma pequena perturbação,  $f_{\alpha 1}$ , em torno do estado de equilíbrio  $f_{\alpha 0}$ , o que permite trabalhar com a equação de Vlasov linearizada.

As equações de Vlasov linearizadas são obtidas perturbando-se os valores de equilíbrio da função  $f_\alpha$  e dos campos  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$ , ou seja

$$f_\alpha = f_{\alpha 0} + \varepsilon f_{\alpha 1} \quad (2.34)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \varepsilon \mathbf{E}_1 \quad (2.35)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \varepsilon \mathbf{B}_1. \quad (2.36)$$

Substituindo nas equações de Maxwell e Vlasov e desprezando o termo  $\varepsilon^2$ , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\alpha 1}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_{\alpha 1} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left( \mathbf{E}_0 + \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{B}}{c} \right) \cdot \nabla_v f_{\alpha 1} = \\ - \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \left( \mathbf{E}_1 + \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{B}}{c} \right) \cdot \nabla_v f_{\alpha 0} \end{aligned}, \quad (2.37)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_1 = 4\pi \sum_\alpha q_\alpha \int f_{\alpha 1} d^3v \quad (2.38)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}_1 = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}_1}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \sum_\alpha q_\alpha \int \mathbf{v} f_{\alpha 1} d^3v \quad (2.39)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}_1 = 0 \quad (2.40)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_1 = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}_1}{\partial t}, \quad (2.41)$$

onde usamos o fato de  $f_{\alpha 0}$  é conhecido e satisfaz o conjunto Vlasov-Maxwell. Para algumas situações físicas as equações linearizadas acima podem ser resolvidas por métodos convencionais. Nosso interesse, como será mostrado no próximo capítulo, é deduzir as relações de dispersão para oscilações presentes no plasma.

## Capítulo 3

### Amortecimento de Landau

#### Introdução

A separação das cargas eletrônicas provenientes da força restauradora, são responsáveis pelos modos coletivos de oscilações do plasma nas proximidades da frequência natural  $\omega_0$ . A equação de transporte de Vlasov-Boltzmann, sem o termo colisional, é utilizada para estudar as características das oscilações longitudinais das cargas eletrônicas (campo elétrico  $E$  paralelo ao vetor de onda  $k$ ). Lev Landau (1908-1968), físico e matemático soviético mostrou que mesmo na ausência de colisões, existe um mecanismo amortecedor das oscilações no plasma [22]. Na interação onda-partícula, os elétrons com velocidade de fase aproximadamente igual a da perturbação são aprisionados (Bohm e Gross sugeriram que o mecanismo físico para o amortecimento seria uma armadilha de elétrons). Os elétrons presos possuem certa dispersão nas velocidades de forma que os mais lentos são acelerados e os mais rápidos são desacelerados. O amortecimento da onda ocorrerá devido uma transferência líquida de energia da onda para os elétrons, pois na distribuição dos elétrons aprisionados existem mais elétrons lentos que rápidos.

As oscilações de alta-frequência são descritas por equações simples. Se a frequência for alta, as colisões dos elétrons com íons e com os próprios elétrons não são importantes e, portanto, a integral colisional pode ser desprezada. Os elétrons desempenham papel crucial e sua função de distribuição varia com o tempo.

#### 3.1 Oscilações eletrostáticas do plasma eletrônico com uma dada função de distribuição inicial

Consideremos que no tempo  $t=0$  uma pequena quantidade de carga pode ser deslocada, a perturbação inicial está relacionada com função distribuição eletrônica

$$f(t=0) = f_0 + \varepsilon f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t), \quad \varepsilon \ll 1. \quad (3.1)$$

Se a densidade de carga perturbada variar em uma dimensão, gerará um campo eletrostático, ou seja, considera-se a perturbação eletrostática, ou o deslocamento das cargas que origina o campo elétrico perturbado, mas não o campo magnético. Neste caso, o campo perturbado satisfaz

$$\nabla \times \mathbf{E}_1 = 0, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi_1. \quad (3.3)$$

Na aproximação eletrostática, as equações cinéticas linearizadas de Vlasov e Poisson (2.37) e (2.38) sem o termo colisional, para a evolução temporal da perturbação na função de distribuição é dada pela solução de [3]

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla f_1 = \frac{e}{m} \nabla \phi_1 \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \quad (3.4)$$

$$\nabla^2 \phi_1 = -4\pi e \int f_1 d^3v \quad , \quad (3.5)$$

onde  $\phi_1$  é o potencial do campo elétrico. As equações (3.4) e (3.5) formam um conjunto de equações acopladas, na qual para obter sua solução precisamos de uma situação física bem definida. Supondo que a distribuição eletrônica (de não equilíbrio) é conhecida inicialmente, o nosso problema é determinar as vibrações resultantes. Nesse problema de valor inicial, as equações podem ser simplificadas tomando a transformada de Fourier com respeito a  $\mathbf{r}$  (solução da forma  $f_1(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) = f_{1\mathbf{k}}(\mathbf{v}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  e  $\phi_1(t, \mathbf{r}) = \phi_{1\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ ), e em seguida, transformada de Fourier parcial de  $f_{1\mathbf{k}}(t, \mathbf{v})$ , a qual se resume a transformada de Laplace no tempo. Matematicamente o problema se reduz a inversão das transformadas de Fourier e Laplace das variáveis dependentes. A componente de Fourier da distribuição inicial  $f_{1\mathbf{k}}(\mathbf{v}, 0)$  é definida por  $g_{\mathbf{k}}(\mathbf{v})$ , escolheremos o eixo  $x$  ao longo da direção definida pelo vetor  $\mathbf{k}$ .

Tomando a transformada de Fourier das equações (3.4) e (3.5),

$$\frac{\partial f_{1\mathbf{k}}}{\partial t} + ikv_x f_{1\mathbf{k}} = ik \frac{e}{m} \nabla \phi_{1\mathbf{k}} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \quad (3.6)$$

$$k^2 \phi_{1\mathbf{k}}(t) = 4\pi e \int f_{1\mathbf{k}} d^3v \quad (3.7)$$

onde  $\phi_{1\mathbf{k}}(t)$  é a componente de Fourier do potencial  $\phi_1(t, \mathbf{r})$ .

A resolução do conjunto de equações acima, segue a transformada de Fourier parcial da função  $f_{1\mathbf{k}}(t, \mathbf{v})$ , definida como

$$f_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{v}) = \int_0^\infty e^{i\omega t} f_{1\mathbf{k}}(t, \mathbf{v}) dt \quad , \quad (3.8)$$

onde  $f_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{v})$  é a transformada. A inversa é dada por

$$f_{1\mathbf{k}}(t, \mathbf{v}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty + ip_0}^{\infty + ip_0} e^{-i\omega t} f_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{v}) d\omega \quad , \quad (3.9)$$

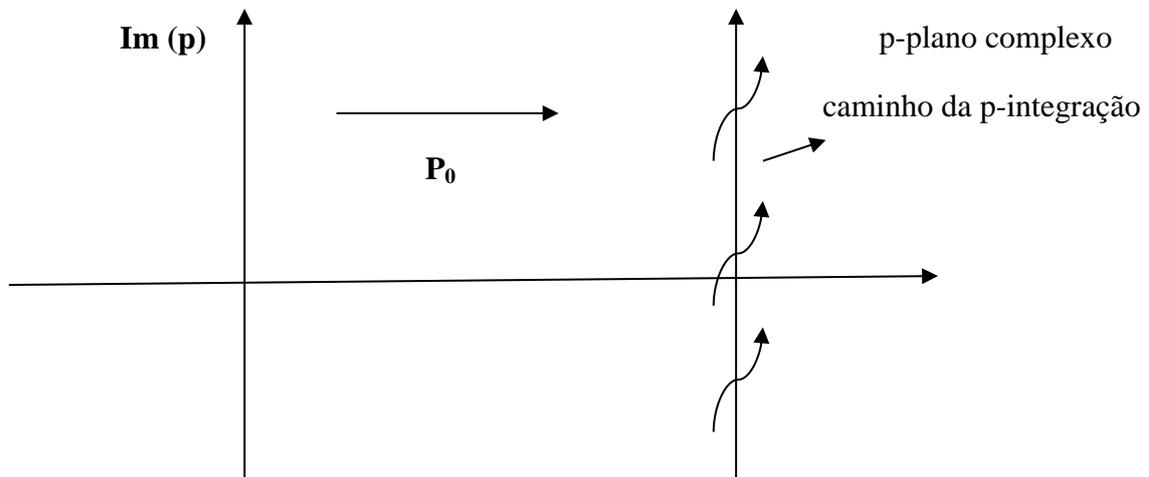
de forma que a integração é realizada ao longo de uma linha reta no plano complexo  $\omega$  paralela ao eixo real e passando por cima ( $p_0 > 0$ ), com todas singularidades de  $f_{\omega k}(\mathbf{v})$  localizando-se abaixo do contorno. A transformada de (3.8) e (3.9) é a transformada de Laplace, pois tomando a mudança de variável  $p = -i\omega$  nas equações acima, obtém-se

$$f_{1p}(\mathbf{v}) = \int_0^{\infty} f_{1k}(\mathbf{v}, t) e^{-pt} dt , \quad (3.10)$$

com a inversa

$$f_{1k}(\mathbf{v}, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty+ip_0}^{\infty+ip_0} f_{1p}(\mathbf{v}) e^{pt} dp . \quad (3.11)$$

Esta integral é calculada no plano da variável complexa  $p$  ao longo de uma linha reta paralela ao eixo imaginário e passando ao lado direito deste ( $p_0 > 0$ ), veja na figura (3.1).



**Figura 3.1:** Contorno de integração para a inversa da transformada de Laplace  $\phi_{1k}(t)$ . A constante  $p_0$  é escolhida de modo que os pólos de  $\phi_{1p}$  estão à esquerda do caminho de integração.

Multiplicando ambos os lados das equações (3.6) e (3.7) por  $e^{-pt}$  e integrando com relação a  $dt$ ,

$$(p + ikv_x) f_{1p} - ik \frac{e}{m} \phi_{1p} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} = g_k , \quad (3.12)$$

$$k^2 \phi_{1p} = 4\pi e \int f_{1p} d^3v . \quad (3.13)$$

Isolando  $f_{1p}$  em (3.12), e inserindo o resultado em (3.13), temos

$$\phi_{1p} = \frac{4\pi e}{k^2} \frac{\int \frac{g_k(\mathbf{v}) d^3v}{p + ikv_x}}{1 - \frac{4\pi e^2}{km} \int \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \frac{d^3v}{p + ikv_x}} . \quad (3.14)$$

A expressão acima resolve o problema considerado, pois determina a distribuição eletrônica e o campo elétrico para uma distribuição inicial arbitrária. A integração sobre  $dv_y$ ,  $dv_z$  pode ser feita diretamente. Introduzindo  $v_x = u$  e

$$g_k(u) = \int g_k(v) dv_y dv_z , \quad (3.15)$$

logo temos

$$\phi_{1p} = \frac{4\pi e}{k^2} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_k(u) du}{p + iku}}{1 - \frac{4\pi e^2}{km} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f_0}{\partial u} \frac{du}{p + iku}} . \quad (3.16)$$

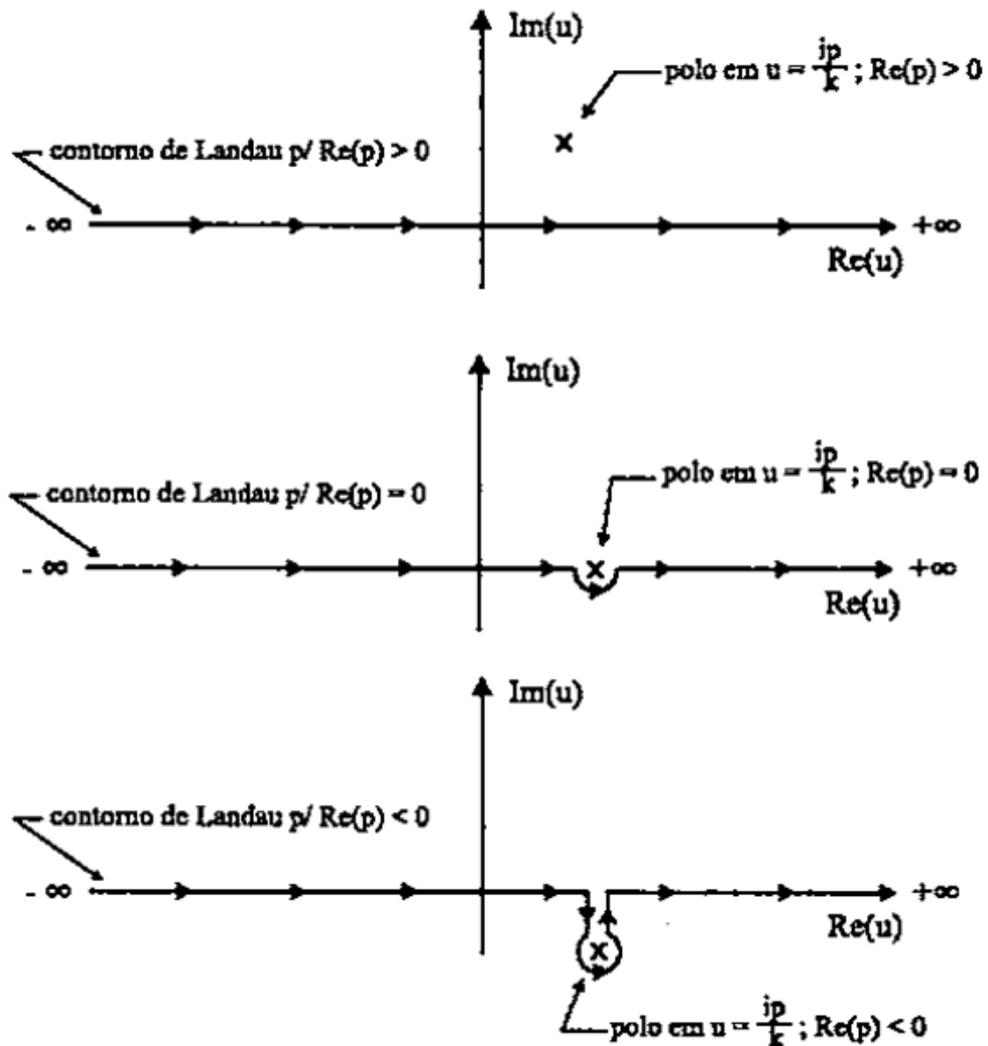
A expressão para  $\phi_{1p}$ , definida por

$$\phi_{1p} = \int_0^{\infty} \phi_{1k}(t) e^{-pt} dt , \quad (3.17)$$

Deve ser uma função da variável complexa  $p$ , sendo calculada na metade direita do plano complexo, onde  $\text{Re}(p) > 0$ . O mesmo se refere à equação (3.16). Entretanto, podemos definir  $\phi_{1p}$  na metade esquerda do plano ( $\text{Re}(p) < 0$ ), como uma continuação analítica da equação (3.16). Se  $g_k(u)$  (função da variável complexa  $u$ ) for analítica em todo plano complexo, ou seja,  $g_k(u)$  for uma função inteira de  $u$  (não possui singularidades em  $u$  finito), então a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{g_k(u) du}{p + iku} , \quad (3.18)$$

continuada analiticamente na metade do plano esquerdo de  $p$ , também define uma função inteira de  $p$  e  $k$ . A continuação analítica desta integral, do lado direito para o esquerdo, realiza-se quando deslocamos o caminho de integração no plano complexo de  $u$  até dentro da metade do plano inferior, de forma tal que o polo  $u = \frac{ip}{k}$  encontra-se na metade inferior, veja na figura (3.2).



**Figura 3.2:** Contornos de Landau para o cálculo da integral (3.18) para três valores diferentes de  $Re(p)$ . O conjunto de contorno garante que a integral em  $u$  é uma função contínua de  $p$ .

Fonte: L. Landau. "On the Vibrations of the Electron Plasma". Institute for Physical Problems, Academy of Science.

levemente desviado do polo  $u = \frac{ip}{k}$ ;  $Re(p) > 0$  para o contorno ao longo do eixo real, e finalmente,

$Re(p) < 0$  ao longo do contorno mostrado na figura (3.2). Assim, esta função não possui singularidades em valores finitos de  $p$ , ou seja, torna-se uma função analítica em todo plano complexo  $p$ .

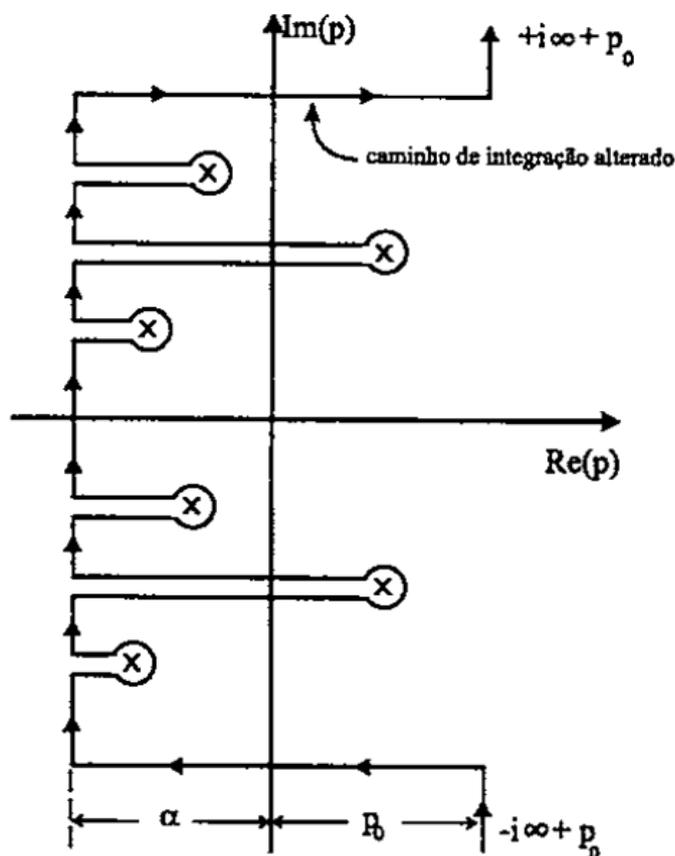
Partindo do mesmo pressuposto para a integral do denominador de (3.16), conclui-se que  $\phi_{1,p}$  torna-se analítica em todo plano, pois trata-se de uma razão de duas funções inteiras. Portanto os polos (singularidades) da função  $\phi_{1,p}$  são os zeros do denominador em (3.16), pois todos os polos estão na metade do plano esquerdo.

Landau [22] mostrou que as considerações acima permitem determinar a forma assintótica do potencial  $\phi_{1k}(t)$  para  $t \gg 1$ . O desenvolvimento temporal de  $\phi_{1k}$  e  $f_{1k}$  é obtido pelas transformações inversas. Encontra-se a dependência temporal da transformada de Fourier do potencial a partir da transformada de Laplace inversa de  $\phi_{1p}$

$$\phi_{1k} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+p_0}^{i\infty+p_0} \phi_{1p} e^{pt} dp, \quad (3.19)$$

onde o caminho da integral é dada pela figura (3.1). Como  $p_0$  foi escolhido para tornar  $\int_0^\infty \phi_{1k} e^{-pt} dt$  convergente se  $p > p_0$ , o contorno da figura (3.1) situa-se à direita de qualquer polo de  $\phi_{1p}$ . Contudo, para  $\phi_{1p}$  definido por (3.16), ou como uma função analítica em todo plano de  $p$ , deslocamos o caminho de integração para a metade do plano esquerdo, de forma a contornar todos os polos de  $\phi_{1p}$  como mostra a figura (3.3). Os polos de  $\phi_{1p}$  são definidos por  $p_k$ , ou seja, raízes da equação

$$\frac{4\pi i e^2}{km} \int_c \frac{df_0}{du} \frac{du}{p+iku} = 1. \quad (3.20)$$



**Figura 3.3:** Contorno deformado para o cálculo de  $\phi_{1k}(t)$  no limite  $t \gg 1$

Ao calcular a integral (3.19) ao longo do caminho mostrado na figura (3.3), para  $t \gg 1$ , observa-se que somente as contribuições de resíduos relativos aos polos  $p_k$  serão importantes

$$\begin{aligned} \phi_{1k}(t) = & \sum_k \lim_{p \rightarrow p_k} (p - p_k) \phi_{1p} e^{p_k t} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty + p_0}^{-i\infty - \alpha} \phi_{1p} e^{pt} dp \\ & + \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty - \alpha}^{i\infty - \alpha} \phi_{1p} e^{pt} dp + \frac{1}{2\pi i} \int_{i\infty - \alpha}^{i\infty + p_0} \phi_{1p} e^{pt} dp \end{aligned} \quad (3.21)$$

A segunda e quarta contribuição de (3.21) são pequenas já que  $\phi_{1p}$  se anula rapidamente quando  $|p| \rightarrow \infty$ , enquanto o terceiro termo torna-se exponencialmente pequeno comparado com as contribuições dos polos quando  $t \rightarrow \infty$ . Desse modo, o potencial do campo  $\phi_{1k}(t)$  fica proporcional a  $e^{p_k t}$ . O fator  $p_k$  divide-se em uma parte periódica e outra decrescente ( $\text{Re}(p) < 0$ ). Tal resultado foi à parte principal obtida por Landau [22]: O campo vai desaparecendo no tempo com uma taxa de amortecimento igual a  $-\text{Re}(p_k)$ .

A equação (3.20) é chamada de relação de dispersão (existe somente no limite  $t \gg 1$ ) e determina  $p_k$ , ou seja, a frequência e a taxa de amortecimento das vibrações. Se todos os polos  $p_k$  encontram-se à esquerda do eixo,  $\text{Re}(p_k) < 0$ , então todas as contribuições para  $\phi_{1k}(t)$  são amortecidas em  $t = 0$ . Se alguns localizam-se a direita,  $\text{Re}(p_k) > 0$ , estes originarão o crescimento do campo elétrico (instabilidade).

De posse da solução de (3.20), no limite  $k \rightarrow \infty$ , o polo  $u = \frac{ip}{k}$ , na figura 3.1 desloca-se para valores grandes de  $|u|$ , pois a função  $f_0(u)$  decresce com  $|u|$ . Neste caso, a integração de (3.20) pode ser calculada por série de potências em primeira aproximação no eixo real. A expansão do integrando em  $k$  leva a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{df_0}{du} du = 0 \quad (3.22)$$

O segundo termo é dada pela expressão

$$\frac{4\pi i e^2}{p^2 m} \int_{-\infty}^{\infty} u \frac{df_0}{du} du = 1 \quad (3.23)$$

Resolvendo por parte a integral de (3.23),

$$\int_{-\infty}^{\infty} u \frac{df_0}{du} du = u f_0 \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f_0 du = -n \quad (3.24)$$



Com base no contexto apresentado pode-se desenhar o semi-círculo AB, através deste ponto, (linha tracejada na figura 3.4), formando um novo caminho de integração. Logo, a equação (3.20) da integração, fica

$$\frac{4\pi ne^2}{k^2 m} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df_0}{du} du \frac{1}{\left(u - \frac{ip}{k}\right)} + i\pi \operatorname{Re}\left(\frac{ip}{k}\right) \right], \quad (3.28)$$

onde a integral ao longo das partes retas do caminho de integração é real no limite de  $\operatorname{Re}(p) = 0$ , e na aproximação considerada neste cálculo, obtém-se  $-\frac{4\pi ne^2}{mp^2}$ . A integral ao longo do semi - círculo equivale ao resíduo ao polo multiplicado por  $\pi$  (metade do círculo total). Logo, temos

$$-\frac{4\pi ne^2}{mp^2} + i \frac{4\pi^2 e^2}{mk^2} \frac{df_0}{du} \Big|_{u=ip/k=1}. \quad (3.29)$$

A introdução de  $p = -i\omega - \gamma$  e a resolução de (3.29) por meio de aproximações sucessivas, resulta na expressão para o coeficiente de amortecimento

$$\gamma = \omega_0 \sqrt{\frac{\pi}{8}} \frac{1}{(k\lambda_D)^3} e^{-(k\lambda_D)^2/2}. \quad (3.30)$$

Da equação acima, vemos que o coeficiente de amortecimento decresce exponencialmente com a diminuição de  $k$ . Em suma, as oscilações eletrostáticas em um plasma eletrônico são descritas por relações de dispersão para ondas não -amortecidas e amortecidas, dadas pelas equações (3.26) e (3.30), respectivamente.

## Capítulo 4

### Simulação do tipo partículas em Células

#### Introdução

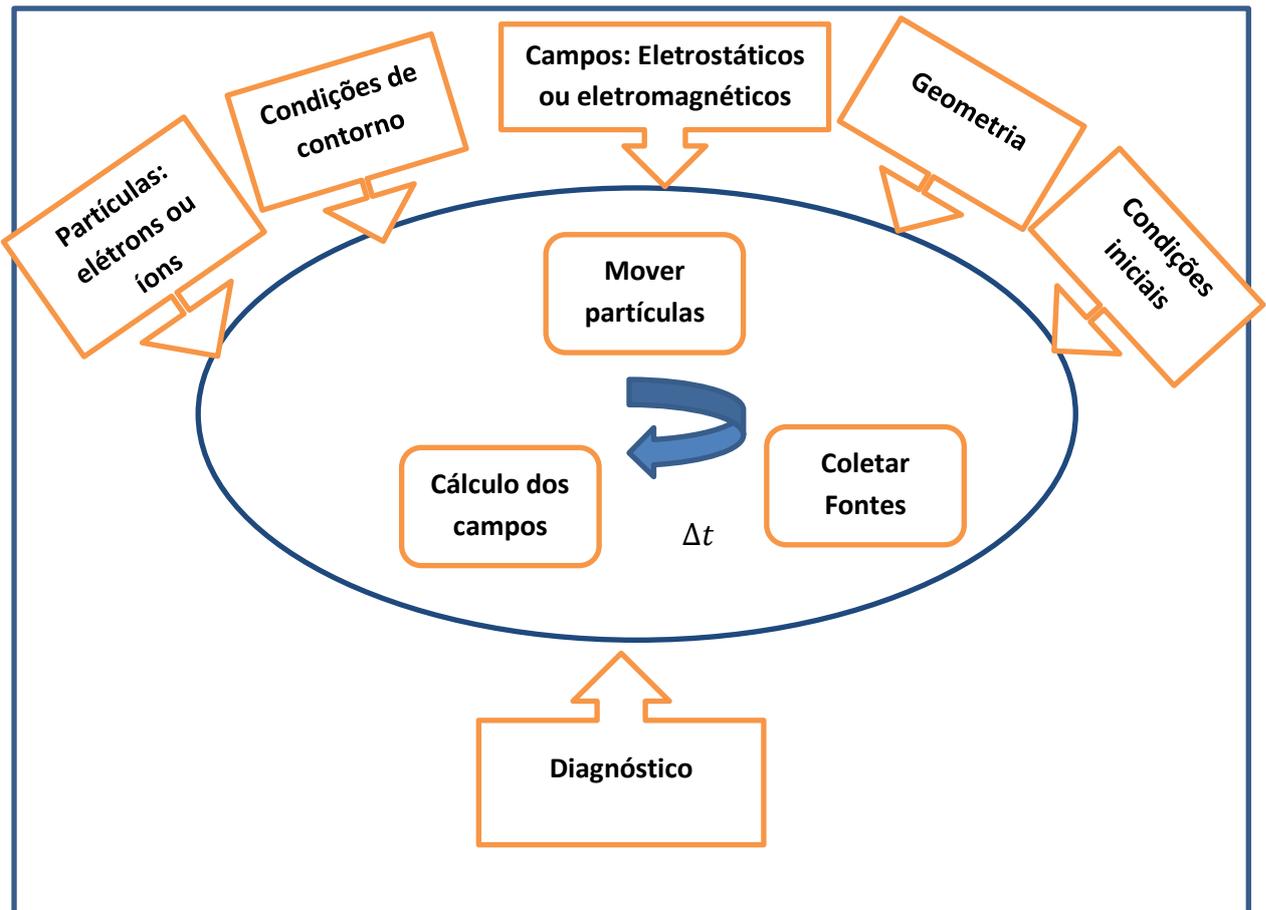
A técnica de partículas em células (PIC) consiste num modelo de partículas eletricamente carregadas, macroscopicamente neutro, e bem definido fisicamente de acordo com as características que deseja simular. O que torna viável esta técnica é que estamos interessados no comportamento coletivo das partículas que compõem o plasma, o que ocorre numa escala de ordem maior ou comparável ao comprimento de Debye. Logo, as partículas usadas na simulação do plasma não são cargas pontuais, mas partículas de “tamanho finito”  $a \approx \lambda_D$ , também chamadas de macropartículas. Se o comprimento  $l$  das dimensões lineares do domínio de simulação forem grandes comparadas ao tamanho das partículas,  $l \gg a$ , então uma coleção de macropartículas se comporta aproximadamente da mesma forma que uma coleção de partículas pontuais, muito embora o modelo de macropartículas suprima flutuações em escala menor que o comprimento de Debye. As simulações de partículas permitem a interpretação de efeitos não lineares, como, por exemplo, instabilidades de ondas, difusão, aquecimento e aceleração de partículas em plasmas espaciais [28].

A simulação cinética tem sido particularmente bem sucedida em lidar com problemas básicos de física, em que as distribuições de partículas se afastam significativamente de uma distribuição *Maxwelliana*, como quando ocorrem ressonâncias onda-partícula, aprisionamento de partículas, ou aquecimento estocástico [18].

#### 4.1 Procedimento para simulação cinética via partículas

Assumindo que estes modelos seguem um esquema onde primeiro as condições físicas do sistema são determinadas, tais como, as condições iniciais, as condições de contorno, a geometria, os tipos de partículas (íons ou elétrons), e o tipo de campo (eletrostático ou eletromagnético). A seguir, utilizando as equações de Maxwell e conhecendo as posições de todas as partículas e suas velocidades, são realizados os cálculos dos campos; as forças sobre as partículas são encontradas usando os campos elétricos e magnéticos na equação de movimento de Newton-Lorentz.

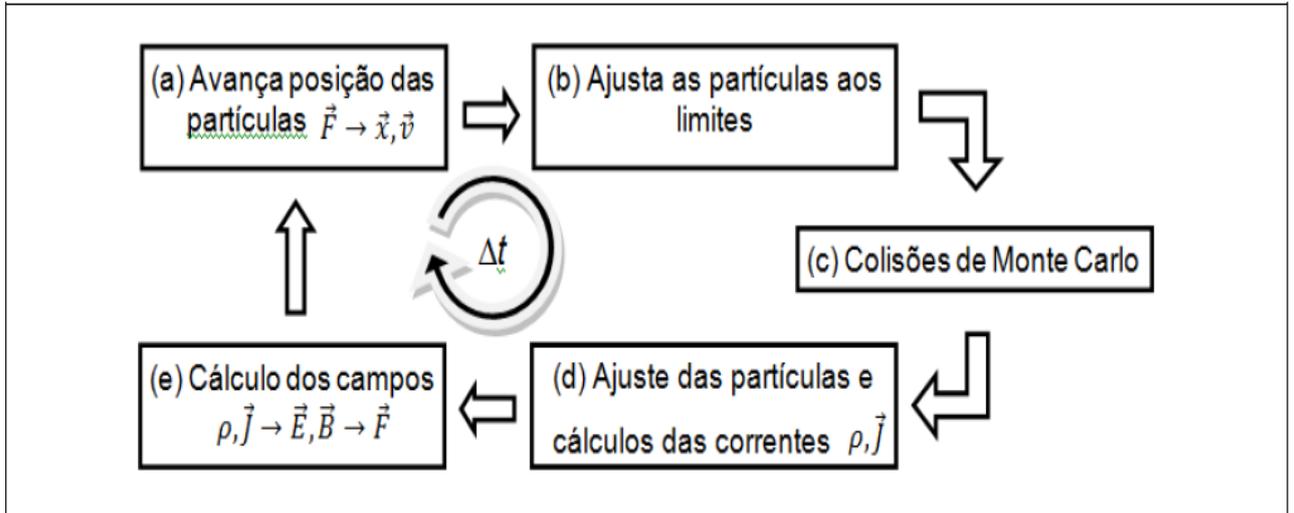
Então, são calculados os campos da carga inicial e densidades de corrente. Em seguida, movem-se as partículas (distâncias pequenas) e recalculam-se os campos devido às partículas estarem em suas novas posições e velocidades. É necessário levar em conta os campos externos e os campos gerados pelo movimento das próprias partículas carregadas. Este processo ocorre num pequeno intervalo de tempo, ou passo temporal,  $\Delta t$ , e é repetido tantas vezes quanto necessário [28]. A figura (4.1) mostra os passos básicos na configuração de uma simulação cinética via partículas, o ciclo de avanço no tempo ( $\Delta t$ ) e os diagnósticos após os cálculos para serem analisados.



**Figura 4.1:** Esquema mostrando o algoritmo de uma simulação de partículas em células.

“O método de simulação por partículas consiste em acompanhar um grande número de partículas carregadas movendo-se sob a ação de forças (ou campos) produzidas pelo próprio movimento das partículas, resultantes da interação entre as mesmas, e/ou campos externamente aplicados [12]. Este método, conhecido como método PIC (*Particle in Cell* – Partícula em Célula) posteriormente foi combinado ao método de colisões MCC (*Monte Carlo Collision* – Colisões de Monte Carlo), aumentando, com isso, a acuidade de suas simulações. A figura (4.2) mostra com mais detalhes as tarefas realizadas em cada intervalo de tempo da execução do método PIC/MCC. No início de cada iteração, a força  $\vec{F}$  sobre cada partícula é calculada levando-se em conta os valores dos campos elétrico  $\vec{E}$  e magnético  $\vec{B}$  no ponto da grade (número finitos de pontos da região de interesse, que são discretizados no espaço físico) onde está a mesma, para que se possa então avançar sua posição  $\vec{x}$  e sua velocidade  $\vec{v}$  através das equações de movimento que seriam utilizadas em partículas reais. Verifica-se então quais partículas atingiram as condições de limite, ou seja, se elas devem ser absorvidas, refletidas, ou combinadas, gerando novas partículas, como mostrado na figura (4.3). É chamado então o algoritmo de colisão MCC (Figura 4.4), que irá definir os resultados das colisões através da geração de números aleatórios e tabelas de valores de seções de choque. A localização e velocidade das partículas que permanecem no sistema são utilizadas para se calcular, através de interpolação, as densidades de carga ( $\rho$ ) e corrente elétrica ( $\vec{J}$ ) na grade (Figura 4.5), e,

com estas grandezas, através das Equações de Maxwell, calculam-se as alterações nos campos e em cada ponto da mesma, e, conseqüentemente a força ( $\vec{F}$ ) que atuará sobre as partículas no próximo intervalo (Figura 4.5). Este procedimento é repetido por vários passos no tempo [29].



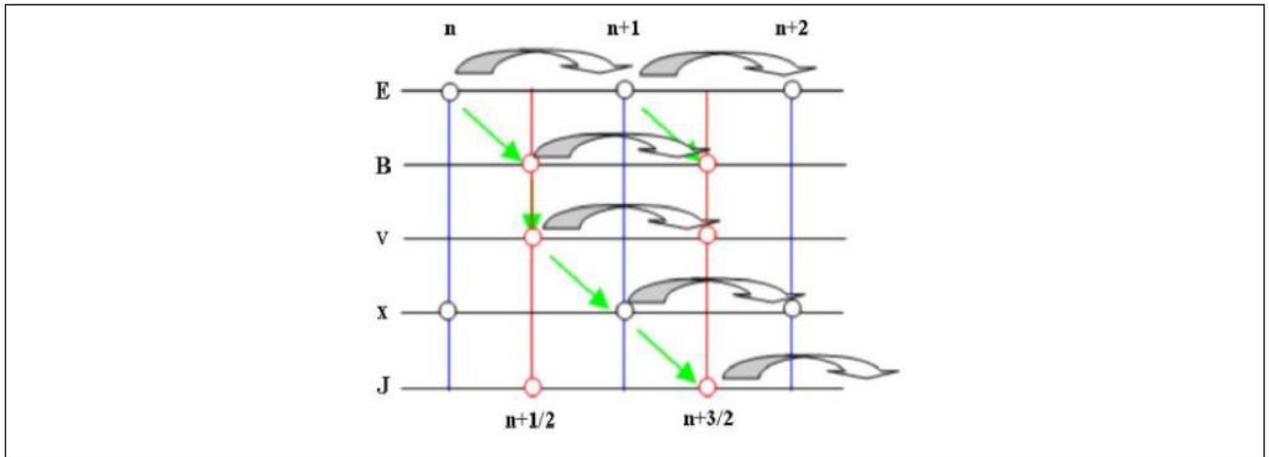
**Figura 4.2:** Esquema do ciclo PIC/ MMC.

Fonte: Adaptada de Vahedi et al., 1993.

Os campos elétrico e magnético são obtidos a partir da densidade de carga e corrente elétrica através das equações de Poisson e de Maxwell. O método de leap-frog é utilizado para avançar os valores dos campos ( $E$  e  $B$ ) e das partículas (posição  $x$ , velocidade  $v$ , e a densidade de corrente  $J$ ) no tempo, conforme mostrado na figura 4.3 . O passo temporal  $\Delta t$  deve ser escolhido de forma que seja pequeno o suficiente para que seja possível observar as variações dos fenômenos estudados,  $\omega p \Delta t \ll 1$ , onde  $\omega p$  é a frequência local do plasma, e que exista estabilidade numérica durante a simulação. A condição de Courant- Fredericks-Lewy (CFL) evita a instabilidade numérica e é dada por

$$\Delta x > v_{max} \Delta t, \quad (4.1)$$

onde  $\Delta x$  é o espaçamento da grade e  $v_{max}$  a velocidade máxima que as partículas do sistema podem adquirir. Esta condição garante que em um passo temporal a distância percorrida pelas partículas com velocidade  $v_{max}$  não será maior que  $\Delta x$ . [28]



**Figura 4.3:** Esquema do método leaprog.

Fonte: Zhou, et al., 2009.

Como a quantidade de partículas reais é muito grande, foi criado o conceito de superpartícula, que representa muitas partículas de um plasma real com tamanho finito, com sua carga distribuída sobre uma região finita do espaço [28].

O número de superpartículas na simulação é encontrado usando

$$N = \frac{initn \cdot area \cdot length}{npf}$$

onde *initn* é a densidade inicial das espécies físicas no sistema [ $m^{-3}$ ];

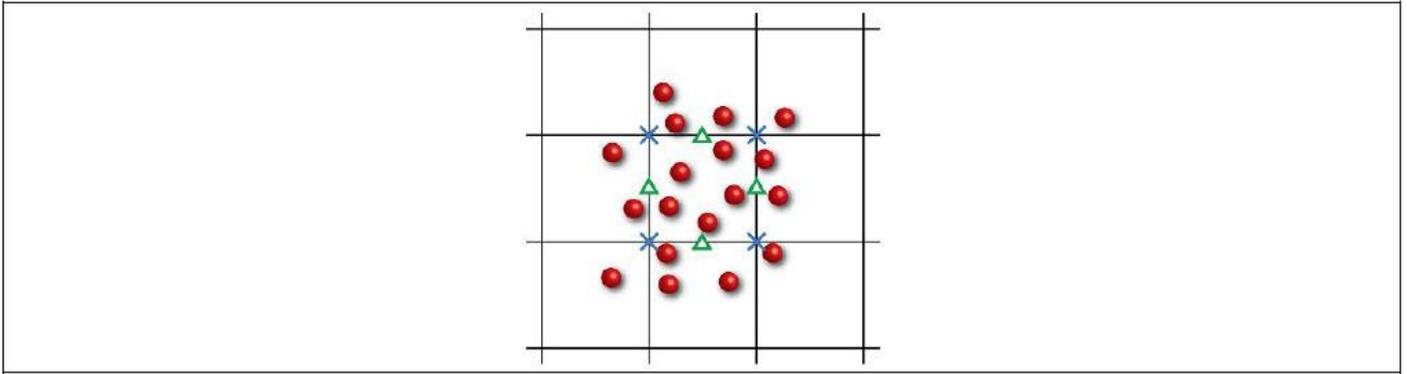
*area* é a área do eletrodo [ $m^2$ ];

*length* é o comprimento do sistema (distância entre os eletrodos) [m];

*npf* é o número de partículas físicas por partícula de computador.

Por exemplo, para  $initn = 1e^{15}$ ;  $area = 0,01$ ;  $length = 0,3$  e  $npf = e^7$ , o número de super partículas  $N = 50.000$ .

As superpartículas são colocadas em uma grade espacial, que representa o espaço físico onde ocorre o experimento (figura 4.4). O espaçamento da grade,  $\Delta x$  (dimensão da célula) para uma simulação unidimensional, deve ser pequeno quando comparado com o menor comprimento de onda de interesse,  $k\Delta x \ll 1$ . Normalmente,  $\Delta x$  varia de um a três comprimentos de Debye [28], se for maior que três comprimentos de Debye surgirá instabilidade numérica [28, 29]. O comprimento de Debye proporciona a medida da distância na qual a influência do campo elétrico de uma partícula individual é sentida pela outra partícula carregada dentro do plasma. O resultado é uma densidade adicional de carga espacial negativa (ou positiva) que cancela o efeito da carga inicial a distâncias maiores em relação ao comprimento característico de Debye dada pela equação (1.1).



**Figura 4.3:** Grade numérica onde as super-partículas  interagem entre si através de campos elétricos e campos magnéticos (símbolos X e Δ).

Fonte: [http://epp.ist.utl.pt/pub/samuel/Press\\_Release/Press\\_Release\\_files/](http://epp.ist.utl.pt/pub/samuel/Press_Release/Press_Release_files/).

Outro fator importante é o número de partículas por ponto na grade, quanto maior o número de partícula por ponto na grade, menor serão as flutuações numéricas relacionadas ao cálculo dos campos eletromagnéticos (BIRDSALL; LANGDON, 2005).

A largura da célula é calculada usando

$$\Delta x = \frac{l}{nc}, \quad (4.2)$$

onde  $nc$  é o número de células espaciais, ou seja, o tamanho da grade. Por exemplo, para  $l = 0,5$  e  $nc = 100$ ,  $\Delta x = 0,005$ .

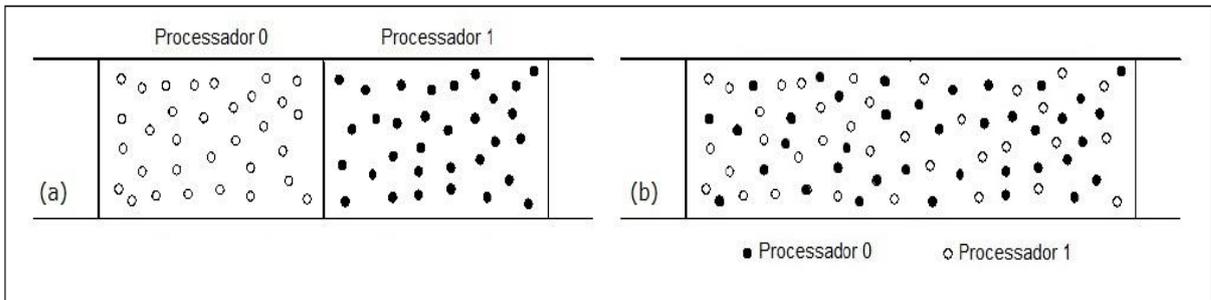
É sobre a grade que são feitos os cálculos dos campos elétricos e magnéticos e das posições e velocidades das partículas. A grade é discretizada e os valores dos campos só são conhecidos em cada um de seus pontos. Dessa forma, se uma partícula encontra-se entre dois desses pontos, o valor do campo é calculado através da interpolação dos valores nos dois pontos vizinhos [30].

O modelo unidimensional pode ser considerado como um grande número de células de partículas carregadas movendo-se sob a ação de um campo elétrico, direcionado ao longo do eixo  $x$ , externamente aplicado e dos campos internos autoconsistentes; não existe variação nas direções  $y$  ou  $z$ .

## 4.2 Paralelização de Códigos PIC

Neste trabalho vamos utilizar a técnica para paralelização o código PIC que envolve duas abordagens básicas do particionamento da carga computacional. Uma é pela divisão das grades numéricas, que contém a densidade das partículas e dos campos eletromagnéticos, caracterizada por uma separação por regiões espaciais (Figura 4.4 a); outra é pela divisão com base nas partículas sobre a quais são realizados os cálculos das posições e velocidades das mesmas, decompondo-se o domínio em termos do índice da partícula no vetor, independente da posição no espaço (Figura 4.4 b). Em cada passo de tempo, informações de campos e densidade das partículas são trocadas entre os processadores. Como as partículas estão em constante movimento, no caso da divisão espacial elas podem sair do domínio de um processador e ir para outro, com isso haverá comunicação e um

desbalanceamento de carga, que deve ser tratado a cada  $n$  ciclos. No outro caso, a cada ciclo as posições das partículas dos diferentes processos devem ser comunicadas, para checagem de eventuais colisões, o que envolve comunicação e o desbalanceamento pode ocorrer como resultado das colisões, reemissões e outros efeitos ocorrendo de forma desigual (o que também pode ocorrer com a outra abordagem).



**Figura 4.4:** Decomposição de domínio em regiões espaciais (a) e decomposição de domínio pelo índice das partículas (b).

Uma estratégia para paralelizar programas PIC é dividir a quantidade de partículas e de pontos nodais entre os processadores no início da simulação, e cada processador realiza todas as operações do código, e possui uma cópia de todas as variáveis envolvidas, não havendo migração de partículas ou de pontos nodais entre os processadores. Esta estratégia é conhecida como decomposição estática para partículas e campos. Sua vantagem é que o balanceamento de carga é sempre mantido, sem esforço adicional de comunicação entre os processadores, e sua desvantagem é a replicação das informações na memória. [31] propuseram um balanceamento dinâmico de carga que foi implementado em um código PIC eletromagnético unidimensional usando um método que adiciona uma sobrecarga muito pequena para o código paralelo. O código foi implementado em paralelo usando o algoritmo *GCPIC (General Concurrent PIC)*, do inglês, em que as partículas são divididas entre os processadores particionando o domínio espacial. Partições são criadas dinamicamente durante a execução de modo que os subdomínios têm aproximadamente os mesmos números de partículas. As partições da grade são calculadas a partir de um perfil aproximado da densidade do plasma, em vez de a partir dos dados das partículas, fazendo com que os cálculos dos limites dos novos subdomínios sejam rápidos e simples. Para todos os casos executados, a eficiência do código paralelo sempre melhora quando o balanceamento de carga dinâmico é usado. Para o caso de teste apresentado na publicação, o tempo de execução foi de 1,8 vezes mais longo quando o balanceamento dinâmico de carga não foi utilizado.

Outra abordagem utilizada é dividir apenas a quantidade de pontos nodais de campo entre os processadores. Esta estratégia diminui a quantidade de informação replicada e o uso de memória, porém, aumenta a comunicação entre os processadores, pois quando as partículas migram de uma região para outra, a interpolação dos valores de campo (efetuada pelo processador encarregado destas partículas) passa a envolver valores nodais que podem estar distribuídos na memória de outros processadores.

Outra proposta envolve a decomposição de domínio. Os subdomínios contêm o mesmo número de partículas e são distribuídos entre os processadores. Da mesma forma, os pontos nodais são distribuídos entre os processadores. No decorrer da simulação, as partículas podem sair ou entrar no subdomínio de outro processador, e a densidade do número de partículas pode mudar sensivelmente, ocorrendo então um desbalanceamento de carga, sendo necessário refazê-lo através de um algoritmo de balanceamento dinâmico otimizado. Esta estratégia foi testada com cerca de 162 milhões de partículas, e verificou-se que o tempo de cálculo dos campos é muito pequeno em relação ao tempo de cálculo total em cada iteração. Logo, pode-se usar um algoritmo de balanceamento mais simples. Uma revisão destas estratégias é encontrada em Carmona e Chandler (1997).

*Para uma grande classe de simulações de plasma, uma decomposição espacial estática de partículas, adequadamente escolhida, pode ser tão eficiente quanto a abordagem com balanceamento dinâmico, com a vantagem de ter menor complexidade implementacional (MARQUES, 2008, p. 57).*

Uma estratégia para balanceamento dinâmico de carga para o algoritmo paralelo desenvolvido por Ferraro, Liewer e Decyk em 1993, é definir grupos de células em subdomínios com excesso de partículas. As instruções relacionadas às partículas que estão nestes grupos são atribuídas uma a uma aos demais processadores com o intuito de restabelecer o balanço de carga. O gerenciamento desses grupos pode se tornar bastante complexo, pois além de novos grupos serem criados, quando uma partícula sai do subdomínio de um processador e conseqüentemente de um grupo, tem que ser determinado qual processador será encarregado do subdomínio para o qual a partícula migrou e para qual grupo ela vai ou se será necessário criar um novo grupo. Shon et al. (2001) propuseram um método para aumentar a velocidade do código de simulação PIC uni e bidimensional (XPDP1 e XPDP2, respectivamente), através da redução do número de partículas durante a execução. Partículas de mesma espécie e bem próximas, e que estão dentro de uma mesma célula, são combinadas em uma partícula que tem maior carga, mantendo as leis de conservação de posição e densidade de carga. A energia é conservada pela divisão do espaço de fase das partículas em cada célula em vários segmentos pequenos pela magnitude e direção da velocidade, e pela fusão das partículas que tenham energias mais próximas no mesmo segmento do espaço de fase. Segundo os autores, este método melhora a estabilidade do código, além de reduzir o tempo de processamento. [32]propuseram duas estratégias de paralelização. A primeira é baseada na decomposição geométrica do domínio computacional (particionamento) entre os nós do computador. Cada nó é responsável por executar tarefas computacionais sobre os *field DOFs* (*field degrees of freedom*, graus de liberdade de campo) e partículas computacionais contidos no respectivo subdomínio (partição). A vantagem desta estratégia decorre do fato de que as operações sobre as partículas não requerem a comunicação entre processos e, conseqüentemente, eles não apresentam nenhuma sobrecarga de comunicação. No entanto, como a distribuição de partículas muda durante a simulação, os campos que impulsionam as partículas vão se tornar desequilibrados. Isto não apenas deteriora o desempenho do algoritmo paralelo, mas, adicionalmente, conduz à falha do cálculo. Entretanto, algumas partículas saem do subdomínio associado ao seu processo e migram para outro processo e, portanto, a comunicação entre processos aumenta. Uma possibilidade para

melhorar o desempenho é alterar a partição do domínio computacional de acordo com a distribuição de partículas. Enquanto isto pode melhorar significativamente o equilíbrio da carga de trabalho computacional, também aumenta a comunicação entre processos devido à troca de dados que ocorre durante a operação de balanceamento de carga. Em alguns casos este custo adicional, ainda compensa o benefício de um melhor balanceamento de carga. A segunda estratégia atribui as partículas computacionais aos processos independentemente de suas posições no domínio computacional. A vantagem desta estratégia é o inerente balanceamento da carga de trabalho, tanto para calcular os campos quanto para movimentar as partículas. No entanto, como as partículas são atribuídas aos processos arbitrariamente, elas podem estar localizadas em uma célula para a qual um determinado processo não mantém as informações necessárias dos *field* DOFs, e elas precisam ser enviadas para este processo. Assim, esta abordagem fornece um balanceamento da carga de trabalho, aumentando os custos de comunicação. Outros algoritmos têm sido propostos que tentam combinar os pontos fortes de ambos os esquemas.

No entender de Wu et al. (2007), existem muito poucos estudos em processamento paralelo do método PIC utilizando a decomposição de domínio dinâmico, que é importante para o método baseado em partícula alcançar melhor balanceamento de carga. Os dois melhores exemplos na literatura, segundo os autores, são os estudos realizados por Seidel et al. (2002) e Liewer e Decyk (1989). Nestes estudos, decomposições de domínio para partículas e para os campos são diferentes, o que requer intensiva comunicação em cada passo de tempo.

Para Decyk e Nortonb, citado por Marques (2008, p. 60),  
*“O número de possíveis combinações entre estratégias e otimizações de paralelização de simulações PIC é considerável. Além disso, não existe uma regra geral; cada simulação particular que executará em uma dada arquitetura e com especificado recurso computacional tem características e limitações que devem ser exploradas convenientemente na busca de melhor eficiência.”*

# Capítulo 5

## Resultados e Discussões

### Introdução

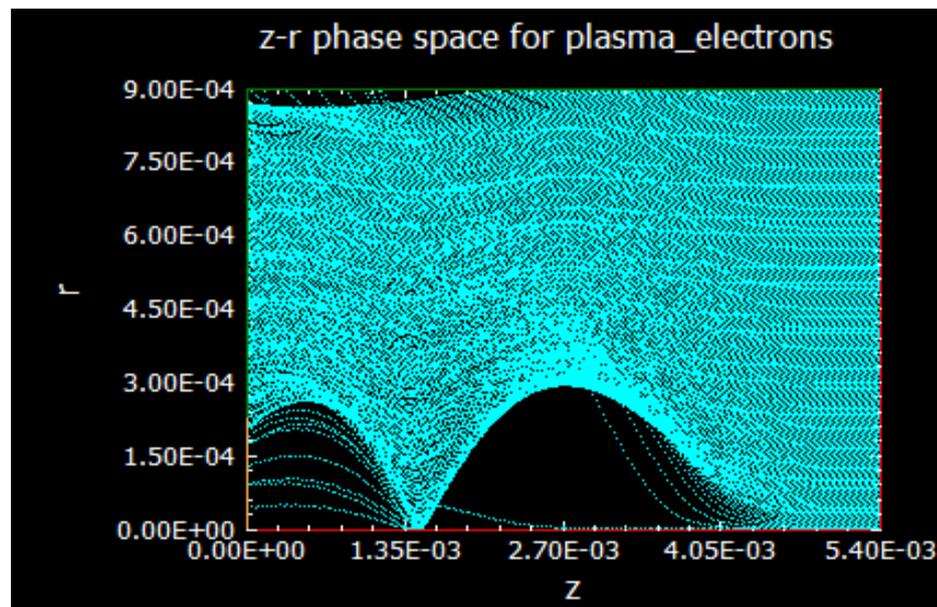
Utilizamos o programa OOPIC Pro do código OSIRIS para modelar o experimento dos “beam – driven plasma wakefield accelerator (PWFA)”, que consiste na geração de novos aceleradores de partículas ultra potentes através de campos auto-consistentes com um energia de 1 GeV/m ao longo de 1 m de plasma. Apresentamos as simulações em 2-D em coordenadas cilíndricas,  $z$  define o eixo de simetria ao longo do pequeno pulso de elétrons se propagando. As simulações consistem nas análises colisionais dos elétrons no experimento E -157 do National Accelerator Laboratory – Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) na Califórnia, utilizando plasma de lítio.

### 5.1 Modelo acelerador de partículas utilizando plasma de Lítio

O modelo consiste na simulação utilizando um feixe de elétrons através de um plasma de lítio, com 900 mm na direção radial e 5400 mm na direção  $z$ , com o número correspondente de pontos de grade, sendo  $n_r = 32$  e  $n_z = 192$  e, para um total de 6144 células. Com 4 macropartículas por células representando os elétrons no plasma, existem 24576 partículas no mesmo. O feixe de elétrons terá a forma de uma Gaussiana e contém uma energia de 30 GeV, sendo representado por 9 macropartículas por célula e o feixe abrange 8 por 64 grades para 4068 partículas do feixe. O tamanho da grade é  $dz = dr = 28$  mm, o passo de tempo escolhido para satisfazer a condição é  $dt = 0,05 * dz/c = 4,69 \times 10^{-14}$  s, assim requer 71400 passos de tempo para propagar o feixe através de 1 metro de lítio de plasma.

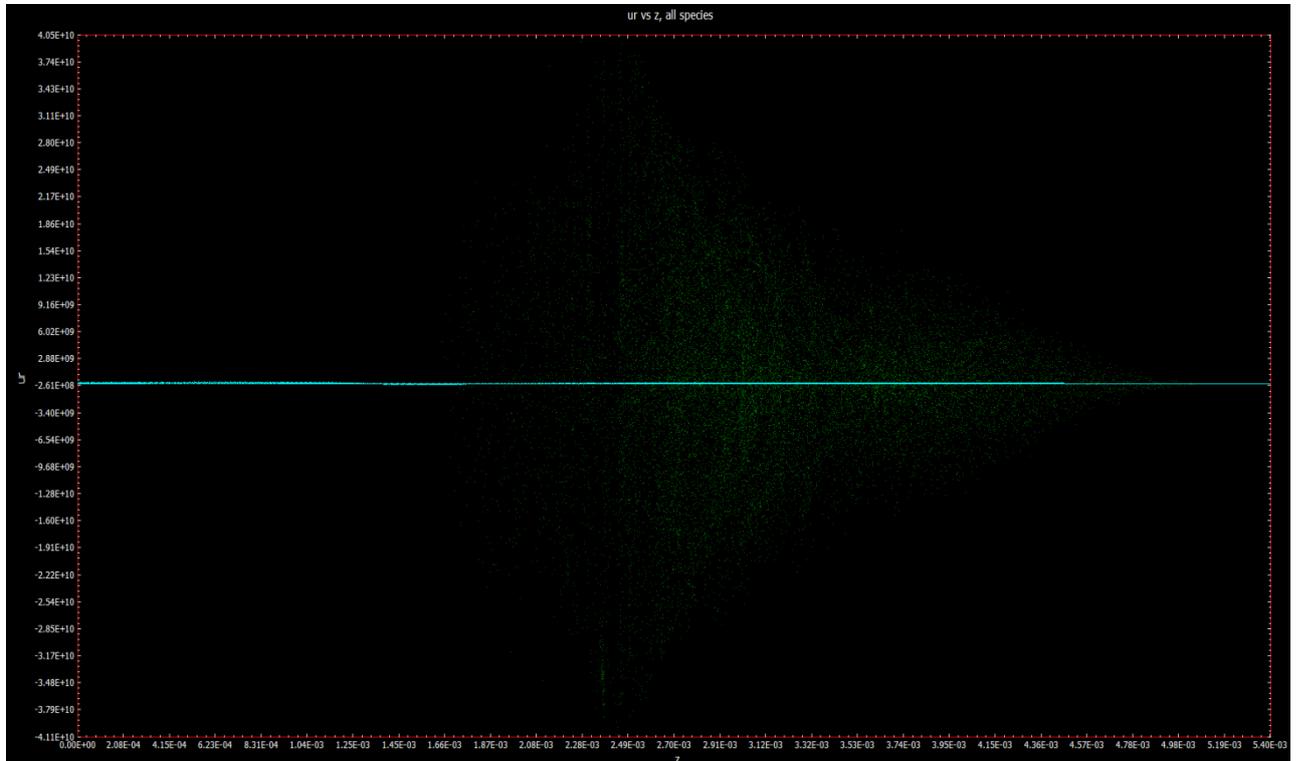
A densidade do plasma é dada por  $2,1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , implicando uma frequência de plasma dos elétrons de  $\omega_p = 8,2 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ , portanto  $\omega_p * dt = 0,04$  é a frequência de plasma do elétron num tempo explícito.

A figura (5.1) mostra a distribuição dos elétrons e íons no plasma na presença de um pulso de elétrons de 30 GeV se propagando ao longo do eixo  $z$  na horizontal. A “Explosão” de elétrons no plasma impulsiona o EPW. Os elétrons no plasma são empurrados perto da “cabeça do feixe”, depois retornam ao perderem energia.



**Figura 5.1:** Plasma “perturbado” por um feixe de elétrons na direção  $z$  com dimensão medida em metros.

Ao inserir o pulso de elétrons no plasma de lítio, percebemos uma movimentação do mesmo que empurram as partículas no plasma, acelerando-os ocorrendo uma dispersão dos elétrons, acarretando uma perda de energia, como é observado na figura (5.2).



**Figura 5.2:** Velocidade radial x posição. Dispersão dos elétrons acarreta perda de energia.

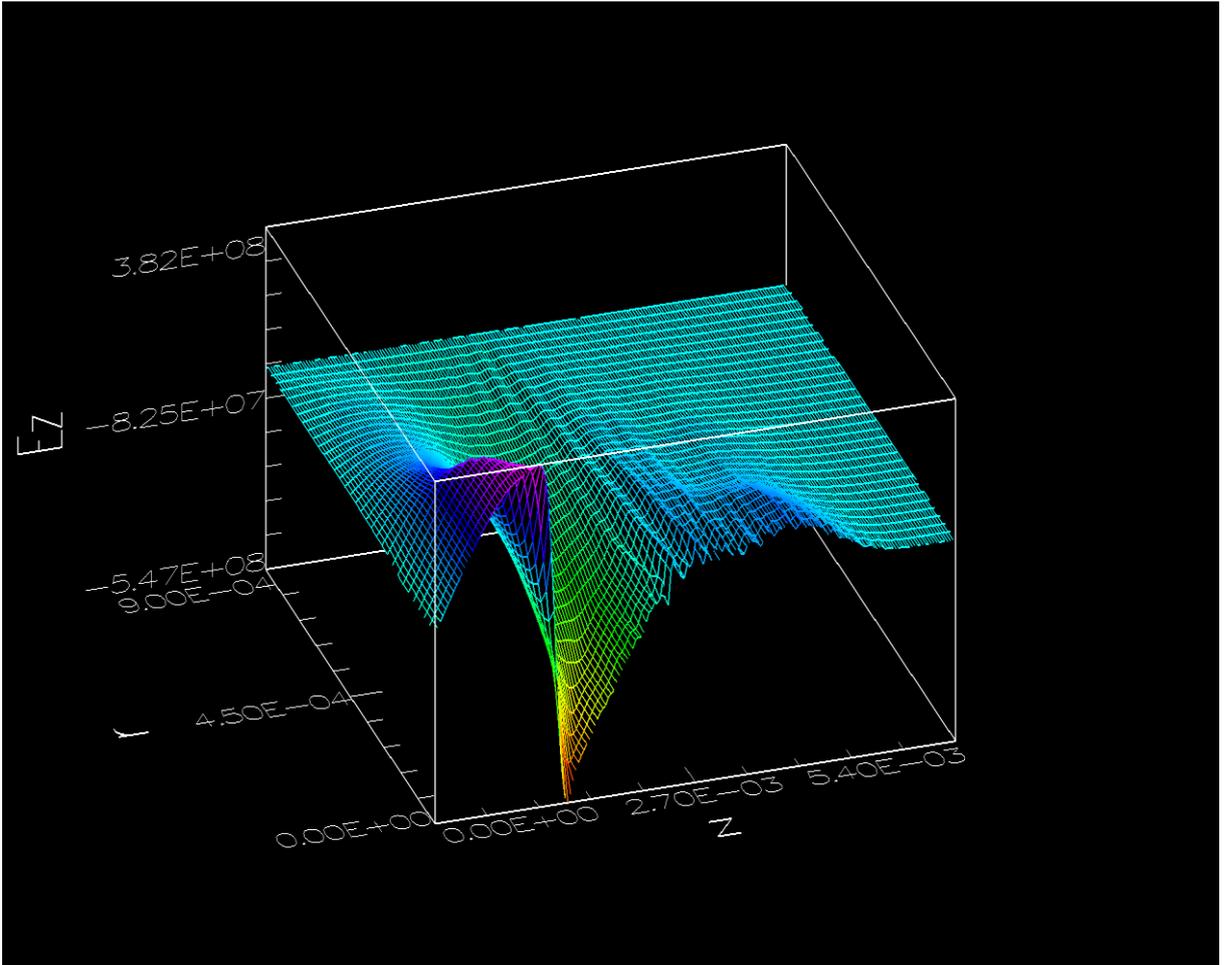
No capítulo 3 abordamos o amortecimento de Landau que resulta na diminuição exponencial em função do tempo de ondas de carga espacial longitudinal no plasma, no qual este fenômeno impede a formação de uma instabilidade no plasma. Porém, a formação dos aceleradores baseados em plasmas, geram uma instabilidade quando emitidos feixes de elétrons, a instabilidade de Farley-Buneman, ou instabilidade de dois feixes como também é conhecida [25]. Um plasma altamente ionizado e não colisional constituído de dois ou mais feixes interpenetrantes de partículas carregadas será instável (ondas longitudinais vão crescer espontaneamente) se a velocidade média das partículas de um dos feixes for suficientemente grande em comparação à velocidade média das partículas do outro feixe. Partículas viajando a velocidades próximas à velocidade de fase da onda interagem com a onda. Se um conjunto suficiente de partículas é acelerado e desacelerado, então a amplitude da onda cresce às custas da energia das partículas. O plasma se torna instável quando o feixe de elétrons se desloca com uma velocidade em relação aos íons  $V_d$  (velocidade de deslocamento relativo entre íons e elétrons) acima de um limite conhecido como velocidade íon-acústica  $C_s$  (equação 5.1). No acaso da onda se propagando em um cone de  $\theta$  graus de abertura, é necessário que a componente do deslocamento relativo elétrons – íons na direção da onda exceda o limite da velocidade íon acústica local ( $V_d \cos \theta > C_s$ ), formando instabilidades de plasma do tipo dois feixes. A figura 5. 4 mostra o campo elétrico na direção radial (visto que este não causa grandes efeitos), onde as ondas devolvem energia para o feixe.

$$C_s = \left( \frac{k_B(T_i + T_e)}{m_i} \right)^{1/2} , \quad (5.1)$$

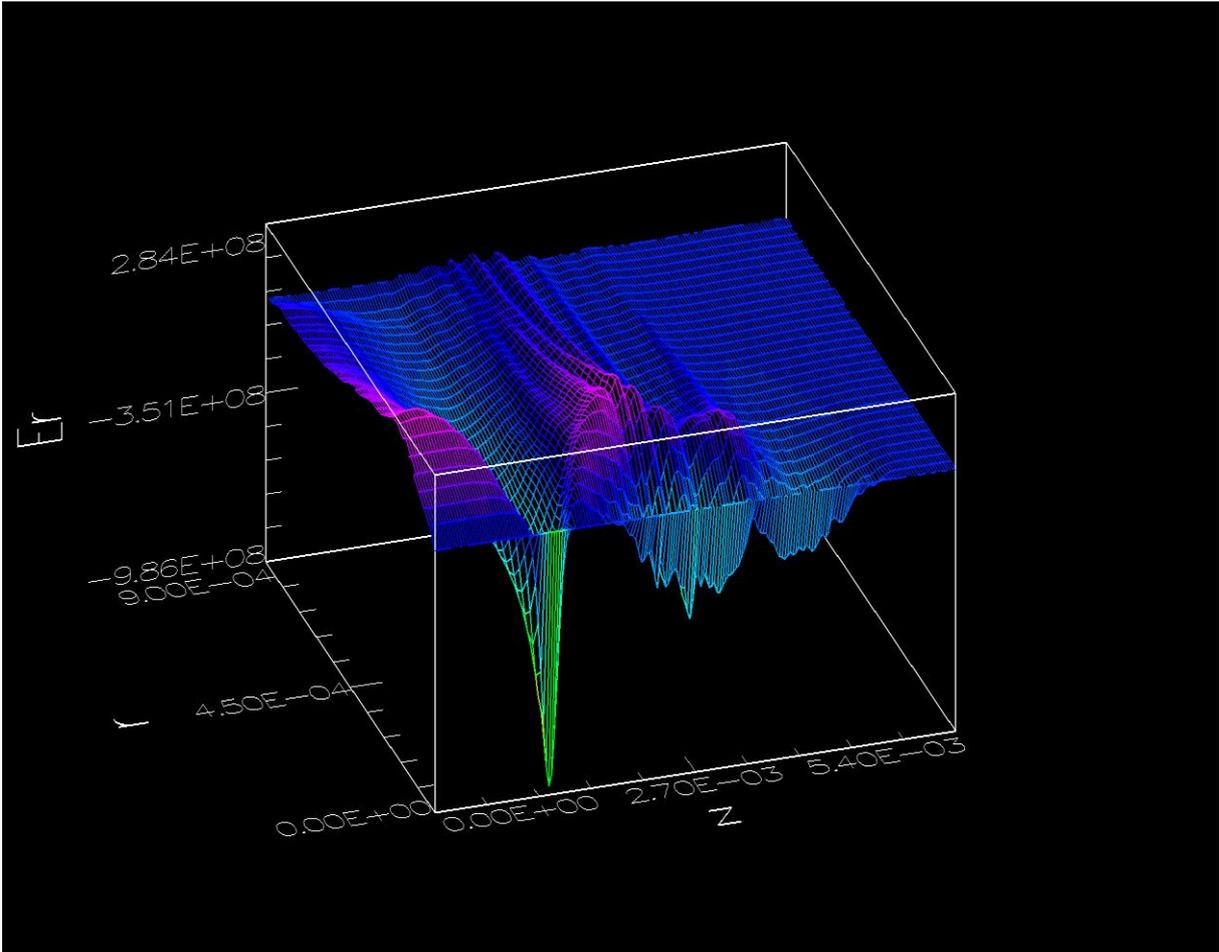
onde  $T_i$  e  $T_e$  são as temperaturas dos íons e dos elétrons,  $m_i$  é a massa dos íons e  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

A figura 5.3 mostra que o feixe de elétrons continua se propagando com poucas alterações, exceto na expansão onde ocorre um pico no campo perturbado na distribuição dos elétrons no plasma. Depois de ser “soprado” para fora da região ao longo do eixo de propagação, os elétrons voltam a se estabilizar, os íons permanecem praticamente parados devido a sua massa. Como o plasma tem  $E = 0$  obedecendo a quase neutralidade, implica que se em uma região tem excesso de elétrons a outra tem falta dos mesmos. O pico representa esse excesso, longe do feixe o campo elétrico é nulo.

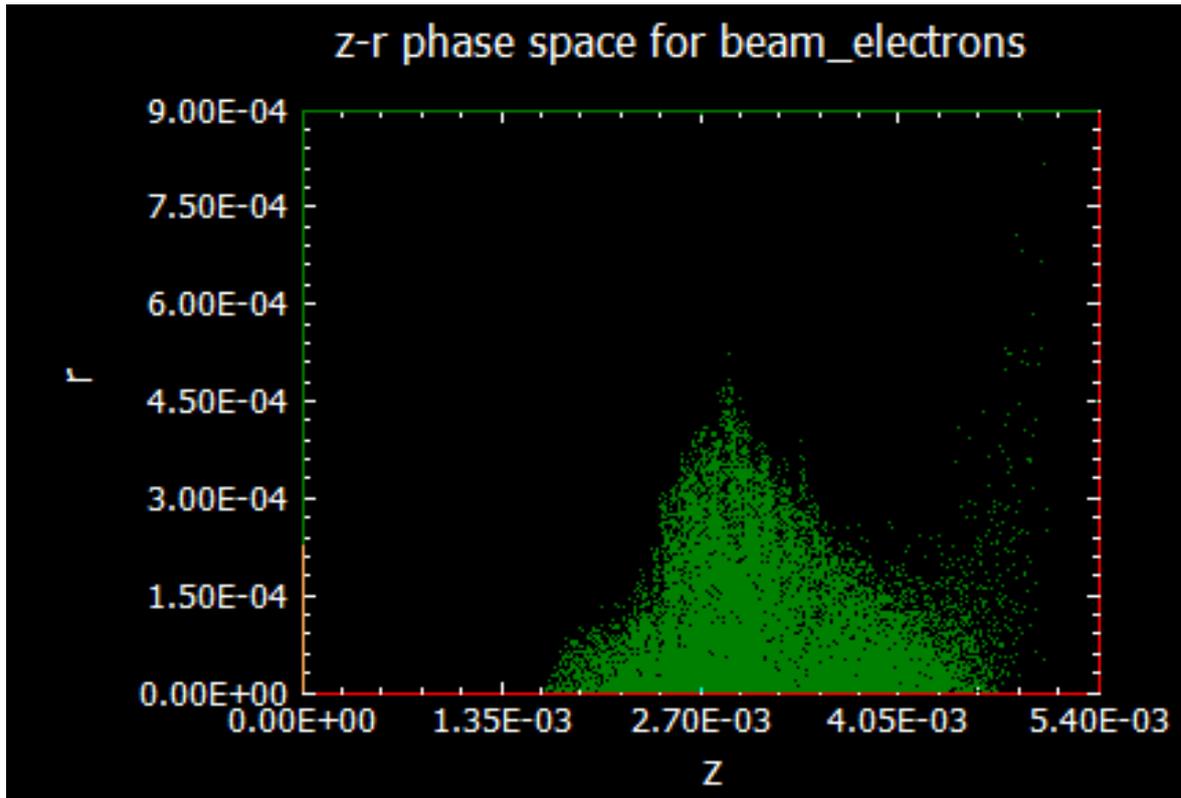
A figura 5.5 mostra a distorção dos feixes de elétrons, os mesmos tem velocidade radial, gerando uma instabilidade no plasma, a energia das ondas do plasma é convertida em energia cinética. Na figura 5.6 vemos a aplicação do mecanismo de Landau, onde existe a transferência da energia das ondas para energia do plasma.



**Figura 5.3:** Campo elétrico longitudinal do pulso de elétrons.



**Figura 5.4:** Campo elétrico na direção radial do pulso de elétrons.



**Figura 5.5:** Concentração de elétrons. Feixes de elétrons são distorcidos e tem velocidade radial, gera instabilidade no plasma, promovendo ondas e a energia das ondas do plasma é convertida em energia cinética.



**Figura 5.6:** Energia cinética tem comprimento finito. Transferência da energia da onda para energia cinética das partículas se dá através do mecanismo de Landau.

# Capítulo 6

## Conclusões

Em suma, apresentamos características das simulações por partículas aplicadas à simulação de plasmas. Mostramos alguns critérios necessários para a realização das simulações computacionais e os passos que devem ser seguidos para a evolução temporal e espacial de um conjunto de partículas de um plasma magnetizado. Mostramos a evolução dos aceleradores a plasma que constituem uma ferramenta fundamental para o desenvolvimento de novos aceleradores mais potentes e com tamanhos reduzidos, gerando campos gigantescos capazes de gerar altas quantidades de energia.

O presente trabalho foi desenvolvido usando o código *PIC (particle-in-cell)*, utilizando um plasma de Lítio e inserindo um feixe de elétrons, criando um campo elétrico intenso capaz de suportar os limites das tecnologias atuais em aceleradores convencionais. O campo elétrico gerado é da ordem de 1 GV/m e o feixe inserido foi de 30 GeV. Ao inserir o feixe de elétrons no plasma de lítio, o mesmo foi perturbado gerando campos altamente consistentes e instabilidades que foram estudadas abordando o amortecimento de Landau e a instabilidade de Farley-Buneman. As equações cinéticas foram utilizadas para resolver o sistema, onde concentram as partículas na malha, mostramos os diagnósticos abordados através das simulações, entre eles o espaço de fase no qual podemos acompanhar as trajetórias das partículas e observar seu comportamento devido às interações com campos eletromagnéticos.

Os gráficos gerados nos mostram o comportamento do feixe de elétrons ao ser inserido no plasma, com isso constatamos a eficiência dos acelerados a plasma, pois os mesmos “varrem” de maneira eficiente uma região onde é gerado um campo elétrico intenso, produzindo altas energias capazes de vencer os limites existentes até hoje.

# Referências Bibliográficas

- [1] R. Assmann *et al.*, "Progress toward E-157: a 1 GeV plasma wakefield accelerator," Proc. 1999 Part. Accel. Conf., p. 330 (IEEE, New York, 1999).
- [2] P. Muggli *et al.*, "Lithium plasma sources for acceleration and focusing of ultra-relativistic electron beams," Proc. 1999 Part. Accel. Conf., 3651 (IEEE, New York, 1999).
- [3] See also <http://www.slac.stanford.edu/grp/arb/e157/>
- [4] R.G. Hemker *et al.*, "Development of a parallel code for modeling plasma based accelerators," Proc. 1999 Part. Accel. Conf., p. 3672 (IEEE, New York, 1999).
- [5] R.G. Hemker, "OSIRIS - an object-oriented parallel 3D PIC code for modeling laser and particle beamplasma interaction," APS Division of Plasma Physics meeting (Seattle, November 1999).
- [6] P. Chen, S. Cheshkov, R. Ruth and T. Tajima, "A multi-TeV collider booster," APS Division of Plasma Physics meeting (Seattle, November 1999).
- [7] P. Chen, J. Dawson, R. Huff and T. Katsouleas, Phys. Rev. Lett. **54**, 693 (1985).
- [8] R. Ruth, A. Chao, P. Morton and P. Wilson, Part. Accel. **17**, 171 (1985)
- [9] T. Katsouleas, S. Lee, S. Chattopadhyay, W. Leemans, R. Assmann, P. Chen, F.J. Decker, R. Iverson, T. Kotseroglou, P. Raimondi, T. Raubenheimer, S. Rokni, R.H. Siemann, D. Walz, D. Whittum, C. Clayton, C. Joshi, K. Marsh, W. Mori, G. Wang. "A PROPOSAL FOR A 1 GeV PLASMA-WAKEFIELD ACCELERATION EXPERIMENT AT SLAC". (Los Angeles, CA 90089-0484, 1998).
- [10] D. Bruhwiler, J. Cary†, Tech-X Corporation, Boulder, CO 80301, USA J. Verboncoeur, P. Mardahl, University of California, Berkeley, CA 94720-1770, USA R. Giacone, University of Colorado, Boulder. " Simulations of Plasma Wakefield acceleration with XOOPI". (Vienna, Austria, 2000).
- [11] M. Samuel, F. Ricardo, S. Luis. " Aceleradores Laser – Plasma aos ombros de Einstein". GoLP, Instituto de Plasmas e Fusão Nuclear.(Lisboa).
- [12] F. J. R Simões Jr. , E. Costa, M.V. Alves, F. R. Cardoso. " Física de plasma espacial utilizando simulação computacional de partículas". Departamento de Física, Universidade Federal de Pelotas, Campus UFPel do Leão; Laboratório Associado de Plasma, INPE, São José dos Campos, SP. (Revista Brasileira de Ensino de Física, V. 33, n. 1, 1310, 2011).
- [13] M. N. Gleber, P. J. Airam, S. Stephan, P. Agnelo. " Uma Abordagem Meshfree para Simulação de Plasmas Não-Colisionais". (Portugal, 2007).
- [14] E. Eric, S. Phillip, K. Jonathan, T. Antonio. " Overview of Plasma- Basead Accelerator Concepts". IEE transactions on plasma science, vol. 24, NO. 2, de abril 1996.
- [15] B. L. David, G. Rodolfo, C. R. Jhon, P. John. "Modeling Beam- Driven and Laser- Driven Plasma Wakefield Accelerators with XOOPI".
- [16] P. Muggli□, M.J. Hogan, C.E. Clayton, S. Wang, R.H. Siemann, B.E. Blue, S. Lee, P. Raimondi, R.H. Iverson, D. Walz, R. Assmann, K.A. Marsh, F.-J. Decker, E.S. Dodd, C. Joshi, T. Katsouelas, W.B. Mori. "**E-157: A PLASMA WAKEFIELD ACCELERATION EXPERIMENT**". *University of Southern California, Los Angeles, CA, USA Stanford Linear Accelerator Center, Menlo Park, CA, USA University of California at Los Angeles, CA, USA CERN, Switzerland.*
- [17] F. F. Chen. " Introduction to plasma physics and controlled fusion". P. 225- 274. University of California, Los Angeles. Segunda edição, editora: KA/PP 1974.

- [18] Birdsall, C. K e Langdon, A.B. "Plasma Physics via Computer Simulations". (McGraw- Hill, 1985).
- [19] Bittencourt, J. A. "Fundamental of Plasma Physics". (Ney York, Pergamon Press, 1995).
- [20] Alves, M. V. E. Bittencourt, J. A., " Simulação Computacional de Fenômenos em Plasmas via Partículas". (Relatório Interno, INPE – 4595- RPE/569, 1998).
- [21] Genthe, K. W. E Roberson, C. W. "Observations of the beam-plasma instability". Phys. Fluids, v. 14, p. 2780, 1971.
- [22] L. Landau. "On the Vibrations of the Electron Plasma". Institute for Physical Problems, Academy of Science. (USSR, 2 de junho de 1945.)
- [23] D. V. Kovalev; A. P. Smirnov; Y. S. Dimant: " Modeling of the Farley-Buneman instability in the E-Region ionosphere: a new hybrid approach". Annales Geophysicae. (27 de novembro de 2007).
- [24] F. Roupinho: "Exploração dos futuros aceleradores laser – plasma com simulações numéricas massivamente paralelas em referenciais de Lorentz arbitrárias".
- [25] A. A. Galeev; R. Z. Sagdeev; V. D Shapiro, and V. I. Shevchenko: "The nonlinear theory of the Buneman instability". Institute of Space Research, Academy of Sciences of the USSR. Sov. Phys. JETP. 54. Aug. 1981.
- [26] W. L. Kruer, The Physics of Laser Plasma Interactions, Addison – Wesley Publishing Company, Inc., (1998).
- [27] T. Tajima; J. M. Dawson. "Laser Electron Accelerator".Departament of Physics, University of California, Los Angeles. Phys. Rev. Lett. 43, 267. (July, 1979).
- [28] SIMÕES JR., F. J. R. Simulação Computacional de Emissões Eletromagnéticas em Plasmas Espaciais. 2008. Tese (Doutorado) – Curso de Pós-graduação em Geofísica Espacial, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais.
- [29] Vahedi, V., G. DiPeso, C.K. Birdsall, M.A. Lieberman, T.G. Rognlien, Capacitive RF discharges modelled by particle-in-cell Monte Carlo simulation. I: analysis of numerical techniques Plasma Sources Sci. Technol., 2, 261-272, 1993.
- [30] VAHEDI, V.; DiPESO, G.; BIRDSALI, C. K.; LIEBERMAN, M. A.; ROGNLIEN, T. D. Capacitive RF discharges modelled by particle-in-cell Monte Carlo simulation. I: analysis of numerical techniques. Plasma Sources Sci. Technol. 1993.
- [31] Decyk, "A General Concurrent Algorithm for Plasma Particle-in-Cell Codes - Liewer, K – 1989.
- [32] WOLFHEIMER, F.; GJONAJ, E.; WEILAND, T. Parallel particle-in-cell (PIC) codes. Proceedings of ICAP 2006, Chamonix, France, THM1MP02, 290–295p., 2006.

