

Отчёт ИВЦ НГУ

Берендеев Е.А.

Тема работы

Разработка суперкомпьютерных технологий и методов моделирования масштабируемости алгоритмов для высокопроизводительных вычислительных систем

Состав коллектива (с указанием места учёбы/работы, учёных степеней и званий).

Берендеев Е.А., ИВМиМГ СО РАН

Научное содержание работы:

Постановка задачи.

Целью работы является создание высокопроизводительных численных моделей и исследование на их основе механизмов генерации электромагнитного излучения при взаимодействии электронных пучков с плазмой.

Необходимо с одной стороны создать адекватную исследуемым процессам численную модель (на данном этапе за основу взята кинетическая модель плазмы и метод решения PIC+ Монте-Карло) и разработать численные схемы для решения основных уравнений. С другой стороны, на основе построенных алгоритмов необходимо провести серию расчётов для моделирования взаимодействия электронных пучков с плазмой и выявить наиболее эффективные схемы генерации электромагнитного излучения. Для этого необходимо варьировать множество параметров, таких как функция распределения плотности плазмы, температура, плотность и скорость пучков. Для решения этих задач необходимы высокопроизводительные параллельные алгоритмы как для 2D, так и для 3D геометрии, поскольку в расчётах используется до 10^{10} модельных частиц.

На суперкомпьютере НГУ планируется проводить вычислительные эксперименты по анализу эффективности различных режимов генерации излучения, а также тестировать параллельные алгоритмы. Работа была выполнена при поддержке гранта РНФ 19-71-00054

Современное состояние проблемы.

Задача генерации ТГц излучения гигаваттного уровня мощности сегодня актуальна для весьма широкого круга фундаментальных и прикладных исследований в физике, химии, биологии и медицине, а также для систем безопасности и ТГц локации. Лидерами в освоении ТГц диапазона частот являются лазеры на свободных электронах, однако необходимость ускорения электронов до ультрарелятивистских энергий влечёт за собой огромные размеры и низкую доступность этих установок. В данном проекте с помощью численного моделирования предполагается исследовать новый подход, основанный на коллективном взаимодействии килоамперных электронных пучков с плазмой. Сочетание компактности и высокой мощности излучения в этом подходе становится возможным благодаря использованию электронов с относительно низкой энергией (1.5-2 МэВ), а также благодаря высокой эффективности их релаксации в плазме. Наши исследования показывают, что возбуждаемые электронным пучком плазменные колебания могут эффективно конвертировать значительную часть своей энергии в электромагнитные (ЭМ) волны, если размер пучково-плазменной системы сопоставим с длиной волны излучения. Килоамперные пучки, способные фокусироваться в пятно с диаметром 1 мм, могут, в частности, производиться на линейном индукционном ускорителе, разработанном в ИЯФ СО РАН, поэтому большой интерес представляет численное моделирование будущего лабораторного эксперимента по инъекции таких мульти-гигаваттных электронных пучков с малым эммитансом в газ или плазму.

Современные вычислительные ресурсы позволяют провести моделирование такого пучково-плазменного взаимодействия и сопутствующих эмиссионных процессов в реальном масштабе. В рамках проекта планируется разработать численные модели

фокусировки в газ электронного пучка с энергией 1.5-2 МэВ, которые основывается на 2D3V аксиально-симметричной и полной 3D3V кинетической модели с учётом процесса ионизации. А также разработать и реализовать методы диагностики возникающего электромагнитного излучения. Для численного решения основных уравнений будет создан эффективный параллельный код, который реализует высокоэффективные методы решения уравнений движения частиц и уравнений электромагнитных волн в плазме, позволяющие проводить вычисления на современных гибридных вычислительных системах петафлопсного класса (до 10^{15} операций в секунду) и задействовать для вычислений несколько тысяч процессорных ядер одновременно. Для приближения к условиям реального эксперимента предлагается учесть в модели ионизацию газа электронным ударом, создать открытые граничные условия, допускающие непрерывную инжекцию электронного пучка в газовую или плазменную среду, а также набор диагностик, позволяющих исследовать характеристики выходящего из фокуса излучения. Полученные в ходе выполнения проекта численные результаты позволят оценить возможность генерации в такой системе ТГц импульсов гигаваттного уровня мощности и выбрать оптимальную схему реализации этого явления в лабораторных экспериментах с линейными индукционными ускорителями в ИЯФ СО РАН.

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Разработан новый параллельный 2D3V аксиально симметричный электромагнитный код на основе метода частиц в ячейках для моделирования коллективного взаимодействия электронных пучков с плазмой. В численной модели наряду с хорошо известными алгоритмами решения уравнений движения частиц и уравнений Максвелла реализован новый метод вычисления плотности тока для использования ядер произвольной формы в цилиндрической геометрии. Также в модели используется схема адаптивной плотности частиц, позволяющая равномерно распределять модельные частицы в аксиально-симметричной 2D геометрии, что существенно повышает точность вычислений по сравнению со стандартными методиками при одинаковом количестве используемых модельных частиц. В коде реализованы открытые граничные условия, позволяющие инжектировать килоамперные пучки электронов в счётную область, занятую плазмой, на протяжении тысяч обратных плазменных частот. Это достигается путём имитации динамики плазмы за границей расчётной области с помощью специальных буферных зон. Для этого используется контроль и воспроизведение поведения плазмы у границы, а также расчёт плотности тока и соответствующих электромагнитных полей от «виртуальных частиц», которые добавляются за границу области исходя из функции распределения частиц у границы. Для проведения вычислительных экспериментов с большим числом модельных частиц ($\sim 10^{10}$ создан) эффективный параллельный алгоритм двухуровневой декомпозиции – разделение вычислительных ресурсов как по ячейкам, так и по частицам.

После отладки и тестирования созданный PIC код был использован для моделирования двух схем генерации терагерцового излучения, которые могут быть реализованы с помощью электронных пучков, производимых разработанными в ИЯФ СО РАН линейными индукционными ускорителями с энергией 2 МэВ. Первая схема предполагает инжекцию в плазму одиночного электронного пучка, который в процессе развития пучковой неустойчивости возбуждает сильно локализованную по радиусу ленгмюровскую волну большой амплитуды, которая, будучи неустойчивой по отношению к продольным модуляционным возмущениям плотности ионов, излучает ЭМ волны по механизму плазменной антенны. В зависимости от длины волны нарастающих возмущений плотности плазмы данный механизм допускает генерацию излучения как на плазменной частоте, так и на её второй гармонике. Численные расчёты инжекции электронного пучка с током 2 кА, энергией 2 МэВ и радиусом фокального пятна 0.5 мм в предварительно приготовленный столб однородной плазмы с плотностью $5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и радиусом 1.5 мм

подтвердили возможность эффективной раскачки ленгмюровской волны в области фокуса пучка. При этом было обнаружено, что из-за филаментации пучка кроме нарастания продольных возмущений, необходимых для включения антенного механизма излучения, на оси происходит формирование глубокого канала, из которого плазма вытесняется в радиальном направлении. Такая радиальная неоднородность в условиях отсутствия ведущего магнитного поля сильно модифицирует как нарастание продольной модуляции ионной плотности, так и последующие процессы эмиссии ЭМ волн. В результате вместо более эффективной генерации ωp -излучения мы наблюдали эмиссию только на второй гармонике плазменной частоты $2\omega p$ с максимальной мощностью, составляющей 1% от мощности инжектируемого пучка.

Вторая схема генерации терагерцового излучения базируется на механизме нелинейного взаимодействия встречных потенциальных волн, имеющих различный радиальный профиль потенциала. Такое лобовое столкновение плазменных волн должно приводить к электромагнитной эмиссии только на второй гармонике плазменной частоты.

Первоначально этот механизм был предложен для схемы столкновения двух кильватерных плазменных волн, которые возбуждаются фемтосекундными лазерными импульсами, однако позднее стало понятно, что аналогичный эффект может наблюдаться ещё и в случае, когда в роли сталкивающихся волн выступают плазменные колебания, непрерывно накачиваемые встречными электронными пучками за счёт развития двухпоточковой неустойчивости. Задачей данного проекта было исследование того, насколько эффективно данный нелинейный процесс может быть реализован с помощью встречных электронных пучков при их фокусировке на плазменную мишень в пятна с различными поперечными размерами. Поскольку в задаче с электронными пучками их длительность может значительно превышать характерные времена динамики ионов плазмы, механизм излучения, который был предложен для однородной плазмы, теперь должен работать в присутствии сильных градиентов плазменной плотности. Кроме уже обнаруженного ранее эффекта формирования на оси радиального канала пониженной плотности, в системе встречных плазменных волн с волновым числом k должна быстро нарастать продольная модуляция плотности плазмы с волновым числом $2k$ за счёт пондеромоторной силы, которая возникает в пучностях образуемой стоячей плазменной волны. Чтобы понять, какую роль (негативную или позитивную) играет такая продольная модуляция ионов в процессе генерации излучения на второй гармонике плазменной частоты, мы с помощью созданного аксиально симметричного PIC кода исследовали сначала более простую систему, в которой взаимодействующие плазменные волны возбуждаются короткими драйверами и благодаря этому имеют гораздо более предсказуемую пространственную структуру. PIC расчёты столкновения в плазме двух лазерных кильватерных волн с несовпадающими профилями потенциала показали, что нарастание продольной модуляции плотности плазмы приводит к более длительной, чем в однородном случае, генерации ЭМ излучения на удвоенной плазменной частоте за счёт включения механизма плазменной антенны. Поскольку эффективность возбуждения потенциальных плазменных волн электронными пучками за счёт развития двухпоточковой неустойчивости гораздо выше, чем эффективность возбуждения кильватерных волн лазерными драйверами, следовало ожидать, что полная эффективность упомянутых механизмов ЭМ эмиссии должна существенно вырасти при переходе к столкновению электронных пучков разного размера. PIC расчёты со встречной инжекцией электронных пучков, имеющих в точке фокуса гауссовы профили с диаметрами 1 мм и 0.5 мм и относительными плотностями 0.01 и 0.02, показали, что эффективность преобразования мощности пучков в мощность терагерцового излучения достигает 0.7%, что более чем на порядок выше, чем в схеме столкновения лазерных импульсов. Установлено также, что эффективность схемы возрастает (выше 1%) в плазме с тяжёлыми ионами за счёт эффективной генерации третьей гармоники плазменной частоты. В настоящее время ведутся контрольные расчёты и подготовка статьи с описанием схемы столкновения сфокусированных электронных

пучков в плазме.

Полученные результаты.

В ходе выполнения первого этапа проекта достигнуты следующие результаты:

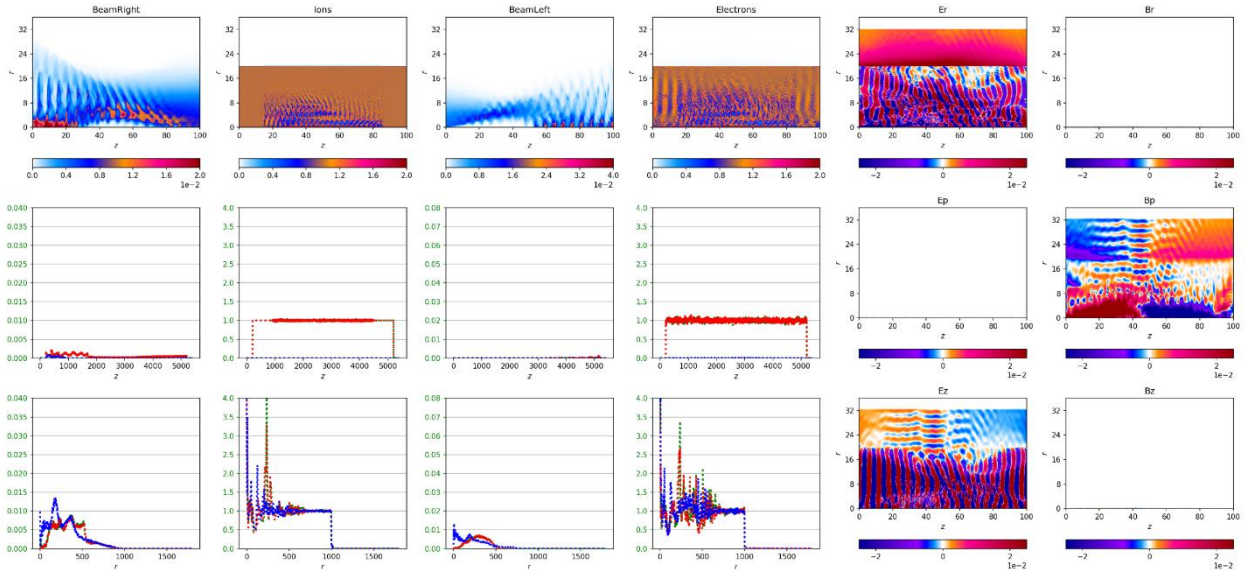
1. Создан 2D3V аксиально симметричный численный код, в котором динамика электронных пучков и всех сортов частиц плазмы в самосогласованных электромагнитных полях моделируется с помощью метода частиц в ячейках. Уникальной особенностью кода является реализация открытых граничных условий, позволяющая инжектировать через границы счётной области в плазму релятивистские электронные пучки с высокой относительной плотностью 0.01 в течение десятков тысяч обратных плазменных частот. Код оснащён диагностиками, необходимыми для изучения спектрального состава, поляризации и пространственного распределения мощности выходящего из плазмы ЭМ излучения.
2. С помощью разработанного PIC кода проведены численные эксперименты по инжекции в заранее приготовленную однородную плазму с плотностью $5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ электронного пучка с кинетической энергией 2 МэВ и током 2 кА, имеющего в точке фокуса гауссовский профиль плотности с характерным диаметром 1 мм. Показано, что область фокуса при характерных параметрах линейного индукционного ускорителя является достаточно протяжённой для эффективной раскачки локализованной по радиусу ленгмюровской волны за счёт развития двухпоточковой неустойчивости, однако в силу отсутствия ведущего магнитного поля наряду с продольной модуляцией плотности плазмы, необходимой для включения механизма плазменной антенны, на оси пучка формируется ещё и сильная радиальная неоднородность. Обнаружено, что результирующий профиль плотности плазмы способствует включению механизма плазменной антенны только для второй гармоники плазменной частоты, а максимальная мощность генерируемого ЭМ излучения составляет 1% от мощности инжектируемого пучка. Установлено, что переход к режиму более эффективной генерации излучения на плазменной частоте в этой схеме требует учёта процессов самосогласованного формирования плазменного канала за счёт ионизации электронным ударом, а также исследования режимов с большими размерами фокусных пятен, что станет возможным только в рамках трёхмерной PIC модели.
3. PIC расчёты инжекции в плазму двух встречных электронных пучков, сфокусированных в пятна разных размеров, при типичных параметрах ЛИУ показали, что эффективность преобразования мощности инжектируемых пучков в мощность излучения на удвоенной плазменной частоте в водородной плазме достигает величины 0.7%, а в плазме с бесконечно тяжёлыми ионами за счёт генерации третьей гармоники превышает 1%.

Иллюстрации, визуализация

На рисунках ниже представлены карты электромагнитных полей и частиц для случая плазмы с подвижными ионами водорода и неподвижными ионами.

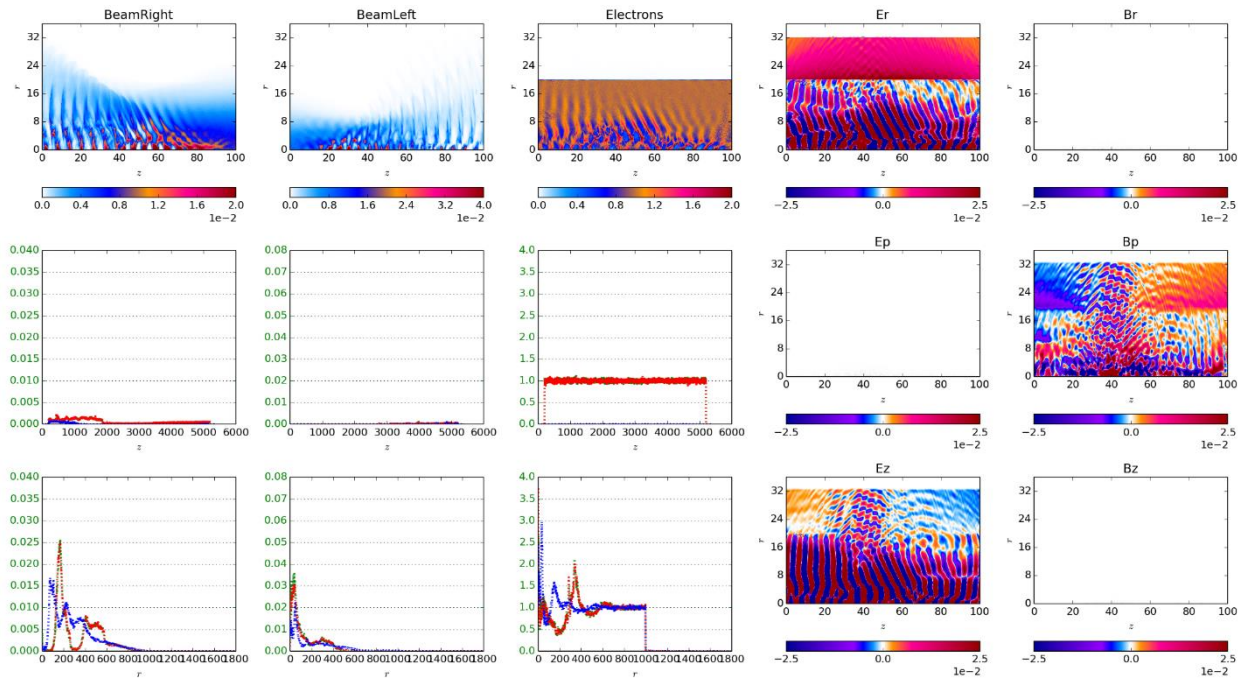
Водородная плазма

$t \cdot \omega_p = 500.0$



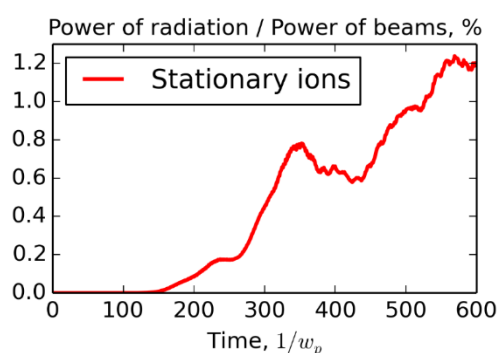
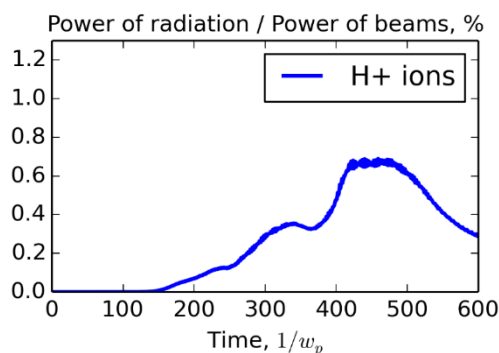
Плазма с неподвижными ионами

$t \cdot \omega_p = 500.0$



Из рисунков видно, что в случае если ионы подвижны, происходит вытеснение электронного пучка из центра, вследствие чего модуляция плотности плазмы достаточно зашумлена и имеет менее регулярную структуру, чем в случае когда ионы неподвижны. Также на рисунках снизу приведены суммарная мощность излучения и фурье-гармоники z-компоненты электрического поля.

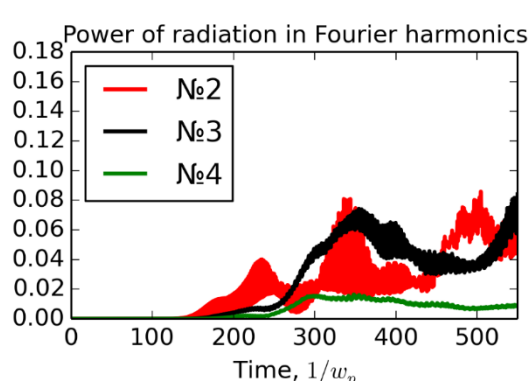
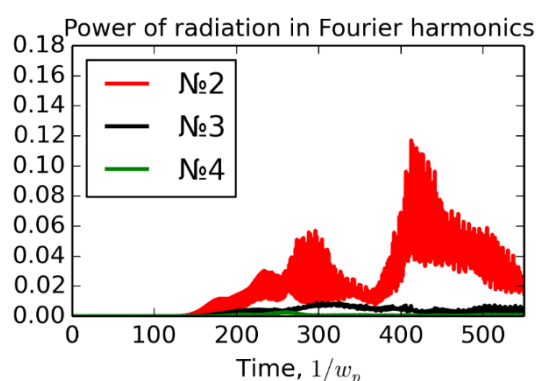
МОЩНОСТЬ ИЗЛУЧЕНИЯ



фурье-гармоники z-компоненты электрического поля

H+ ионы

неподвижные ионы



Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Для решение поставленной задачи необходима большая вычислительная мощность, поскольку требуется рассчитывать траектории миллиардов модельных частиц. В рамках выполнения проекта активно использовался кластер НГУ. Основные расчёты были проведены именно на нём.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть). Указать импакт-фактор журнала (Thomson Reuters, РИНЦ,...).

1. I.V. Timofeev, E.A. Berendeev, V.V. Annenkov, E.P. Volchok. Simulations of electromagnetic emission from colliding laser wakefields // Plasma Physics and Controlled Fusion, 2020, v. 62, p. 045017. <https://doi.org/10.1088/1361-6587/ab74e6> IF 2.799 (есть ссылка на использование ресурсов НГУ)

Ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также Ваши предложения по их совершенствованию.

Использование ресурсов ИВЦ НГУ является необходимым, т. к. решаются задачи большой вычислительной сложности. По работе с пользователями ИВЦ НГУ выгодно отличается от других суперкомпьютерных центров. Из недостатков можно отметить разве что слишком большую загруженность кластера и долгое ожидание в очереди задач