

## Отчёт ИВЦ НГУ

Берендеев Е.А.

### Тема работы

Разработка алгоритмов и программного обеспечения для суперкомпьютерного моделирования терагерцового излучения в плазме

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

Берендеев Е.А., ИВМиМГ СО РАН

**Работа выполнена при поддержке** госзадания № 0315-2019-0009, РФФИ № 19-07-00446

### Аннотация

В ходе выполнения проекта были разработаны численные коды на основе метода частиц в ячейках, позволяющие моделировать генерацию мощного терагерцового излучения при столкновении в газовой струе двух фемтосекундных лазерных импульсов. С помощью разработанного аксиально симметричного 2D3V PIC-кода проведено численное моделирование лобового столкновения лазерных пучков. Была создана модель самосогласованных процессов полевой ионизации гелия. На основе этой модели было подтверждено, что поперечные неоднородности плотности в образуемом плазменном канале не оказывают сильного влияния на динамику лазерных кильватерных волн, благодаря чему этот лёгкий газ может быть выбран в качестве основного рабочего газа. Был разработан параллельный алгоритм движения частиц в аксиально-симметричной геометрии с учётом процессов ионизации и адаптивной концентрации. Кроме того, относительно низкая ресурсоёмкость двумерной модели позволила исследовать зависимость эффективности генерации излучения на второй гармонике плазменной частоты от задержки между приходами лазерных пучков в точку фокуса и установить её оптимальное значение (широкий пучок должен приходиться на 2.5 пс раньше узкого при базовых параметрах эксперимента). Чтобы понять, насколько сильно эффективность схемы и угловое распределение генерируемого излучения чувствительны к конечному углу между лазерными осями, была создана полная 3D модель. Расчёты по этой модели полностью подтвердили предсказания теории, основанной на вычислении интенсивности излучения в дальней зоне источника, что позволило дать рекомендации по правильному размещению диагностик ТГц излучения в эксперименте. В двумерном варианте этой модели были также исследованы процессы возбуждения профилированных кильватерных волн с помощью интерферирующих лазерных импульсов и показано, что столкновение таких плазменных волн делает схему в десятки раз более эффективной и масштабируемой на самые мощные в мире лазерные системы.

### Научное содержание работы:

#### Постановка задачи.

Целью проекта является разработка высокопроизводительных параллельных алгоритмов для решения кинетико-вероятностных уравнений физики плазмы и создания на их основе 3D кода для определения наиболее эффективных режимов генерации ТГц излучения для параметров петаваттных лазерных систем, а также интерпретации данных лабораторных экспериментов.

Для достижения указанной цели предлагается решить следующие задачи:

1. Создание трёхмерного параметризованного кода на основе шаблонов C++ для моделирования рассматриваемых эффектов на основе кинетической модели и метода Монте-Карло. Для максимально реалистичного моделирования в 3D PIC модели будут учтены как процессы ионизации газовой струи лазерным излучением, способные повлиять на фокусировку генерируемого излучения, так и динамика ионов с реальной массой,

приводящая к ограничению времени жизни возбуждаемых в плазме кильватерных полей.

2. Создание и программная реализация параллельного алгоритма, способного обеспечить эффективность распараллеливания выше 90 % до нескольких сотен тысяч процессоров.

Такую высокую эффективность предлагается достигать за счет реализации схемы трехмерной эйлерово-лагранжевой декомпозиции расчетной области с использованием централизованного алгоритма динамической балансировки загрузки.

3. Проведение вычислительных экспериментов для определения наиболее эффективных режимов генерации ТГц излучения для параметров петаваттных лазерных систем, а также интерпретации данных лабораторных экспериментов.

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.

### **Современное состояние проблемы.**

Мощные импульсы когерентного терагерцового излучения сегодня представляют большой интерес как для изучения новой фундаментальной физики, связанной с возбуждением различных коллективных степеней свободы в твёрдом теле (спиновые волны, колебания кристаллических решеток, фотоиндуцированная сверхпроводимость), так и для различных приложений в химии, биологии, медицине и сфере безопасности. Несмотря на существующие потребности, генерация электромагнитного (ЭМ) излучения высокой мощности в терагерцовом диапазоне частот (0.3-20 ТГц) представляет собой весьма сложную задачу. Предварительные численные эксперименты методом частиц в ячейках (particle-in-cell, PIC) установили, что основным фактором, ограничивающим время жизни встречных кильватерных волн, является нарастание продольной модуляции плотности ионов из-за ВЧ давления в образуемой стоячей плазменной волне. Однако, для интерпретации данных экспериментов, а также для поиска наиболее эффективных режимов генерации ТГц излучения для параметров самых мощных в мире лазерных систем, необходимо полномасштабное 3D моделирование.

Программные комплексы, используемые для моделирования процессов в плазме, представляют большую коммерческую ценность при разработке технологических плазменных систем. Работы по детальному моделированию плазмы в значительной степени сконцентрированы в зарубежных корпоративных исследовательских центрах и охраняются в режиме коммерческой тайны. В частности, из общедоступных коммерческих систем для численного моделирования можно отметить пакет COMSOL MULTIPHYSICS, в последнюю версию которого хотя и включен модуль для моделирования плазмы в гидродинамическом приближении, но он не позволяет учесть кинетические эффекты. Существующие в открытом доступе программные пакеты для моделирования плазмы (OOPIC, KARAT) не позволяют достичь высокой производительности на современных вычислительных архитектурах и во многом устарели. Многие современные пакеты кинетического моделирования (AlaDyn, PICADOR, OSIRIS и т.п.) обладают высокой производительностью, однако, в них используются достаточно упрощённые модели (либо только кинетика, либо только гидродинамика, а также ограниченный набор возможных вероятностных процессов в плазме). Создание современного отечественного программного комплекса для суперкомпьютеров петафлопсной производительности и гибридной архитектуры на основе новых подходов в математической части модели (таких как открытые границы, аксиальная симметричность, ионизация) является очень востребованной на данный момент.

### **Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.**

Для полномасштабного проведения численных экспериментов по генерации ТГц излучения при нелинейном взаимодействии двух лазерных кильватерных волн предложен упрощённый подход виртуальных лазерных импульсов, позволяющий не разрешать длину волны лазера. В этом случае, вместо быстрых осцилляций в лазерном поле, плазменные электроны участвуют только в медленных движениях под действием пондеромоторной силы, изменяющейся на масштабе огибающей лазерного импульса. Поперечный профиль электрического потенциала в кильватерной волне связан с профилем лазерного импульса, а для появления нелинейного тока, способного излучать ЭМ волны на второй гармонике плазменной частоты, профили встречных плазменных волн не должны совпадать друг с другом. Таким образом, в численной модели к силе, действующей на электроны со стороны самосогласованно эволюционирующих плазменных полей добавляются пондеромоторные силы от пары виртуальных лазерных импульсов разного размера, которые испытывают дифракцию и не испытывают обратного воздействия плазмы на свою эволюцию. Во все PIC модели включены процессы ионизации газа полями лазерного излучения. При малых значениях полей скорость ионизации определяется туннельным эффектом, в сильных полях происходит переход в надбарьерный режим, а для промежуточных полей используется аппроксимация Бауэра-Малсера. Таким образом, была реализована новая гибридная кинетико-вероятностная модель, дополненная нейтральными атомами. На каждом шаге с помощью метода Монте-Карло рассчитывается вероятность ионизации, исходя из величины электрического поля, затем определяется тип ионизации, в результате которого нейтральный атом преобразуется в ион и электрон. Данный механизм был также распространён на произвольные, в том числе заряженные частицы, движущиеся в самосогласованном электромагнитном поле, в частности был добавлен механизм ионизации иона  $\text{He}^+$  в  $\text{He}^{2+}$  и электрон.

Для объединения 2D и 3D PIC моделей код был модифицирован следующим образом. Создана система 2D и 3D векторов и операций над ними (сложение, умножение и т.п.), на базе которых строятся векторные поля и сетка. Частицы также задаются через вектор координат и импульсов. Для решения уравнений Максвелла по схеме Yee созданы отдельные решатели в аксиально-симметричном и полностью 3D декартовом случае, тем не менее выполненные на базе одних и тех же векторов с помощью двойного обращения к одним и тем же полям вектора через методы (например к первому полю `double d[3]` вектора предоставлен доступ через методы `x()` и `r()`). Движение частиц происходит по схеме Бориса, поэтому здесь нет необходимости в двойном доступе. Ионизация и диагностика также не привязана к конкретной размерности и геометрии. Открытые граничные условия и распространение лазеров идёт вдоль направления Z, здесь также нет необходимости к преобразованию координат.

Для кода разработан единый интерфейс через Python, в котором задаются основные параметры системы, какие частицы используются в моделировании, параметры лазеров. Здесь же указывается размерность задачи и выполняется условная компиляция C++ кода. Отдельно отметим параллельный алгоритм для распределённой памяти. В основе параллелизма лежит стандартная двухуровневая декомпозиция – линейная декомпозиция по области и дополнительная декомпозиция по частицам внутри каждой подобласти. Это позволяет использовать одни и те же функции пересылки и обменов по технологии MPI в 2D и 3D случае (поскольку данные всё равно хранятся линейно и обмен также идёт вдоль направления Z).

### **Полученные результаты.**

1. Разработана 2D3V аксиально симметричная PIC модель, с помощью которой проведены полномасштабные расчёты лабораторного эксперимента в ИЛФ СО РАН по генерации ЭМ волн на второй гармонике плазменной частоты при столкновении в сверхзвуковой газовой

струе двух фемтосекундных лазерных импульсов. Возможность моделирования явления в полном масштабе появилась благодаря использованию упрощённого описания лазерного излучения, воздействие которого на плазму ограничивается только пондеромоторной силой, определяемой огибающей лазерного импульса. Для этого для каждой частицы вычислялась сила, действующая на неё со стороны других частиц (через решение самосогласованных уравнений Власова-Максвелла), к которой добавлялась пондеромоторная сила, рассчитанная из нахождения в данном месте лазерного импульса. Данный подход позволил существенно сократить вычисления за счёт увеличения шага сетки для электромагнитных полей.

2. Разработанный код был протестирован и адаптирован под различные архитектуры – классическая процессорная архитектура (на основе процессоров Intel Broadwell, IBM Power9), ускорители Intel KNL, а также графические ускорители Nvidia. Основными компонентами кода на высоком уровне являются шаблонные классы "массив частиц заданного сорта", "поле сил" и "расчётная область". При этом в рамках двухуровневой декомпозиции на первом уровне каждая группа процессоров имеет свою вычислительную подобласть общей области моделирования, а внутри группы процессоров частицы делятся по доступным вычислительным ядрам. Получены высокие показатели производительности кода (~10% пиковой производительности Nvidia Tesla V100 и ~20% процессоров Intel и IBM).

3. В 2D3V аксиально симметричную PIC модель включены процессы ионизации атомов гелия электрическими полями лазерных импульсов. Показано, что используемые в эксперименте лазерные импульсы имеют достаточно большие амплитуды, чтобы полностью ионизовать плазму в канале, радиус которого значительно превышает характерный поперечный размер возбуждаемых кильватерных волн. Таким образом, установлено, что поперечные неоднородности плотности плазмы, связанные с неполной ионизацией гелия на периферии лазерных пучков, не влияют на время жизни кильватерных волн и на длительность производимого ими излучения.

4. Для перехода к полному 3D моделированию был изменён подход к организации кода. Вместо отдельных 3D и 2D кодов было принято решение разработать единую систему объектов с единым интерфейсом и задаваемыми параметрами. В рамках такого подхода один и тот же расчёт можно рассматривать в обоих размерностях, проводя относительно «быстрые» расчёты по поиску оптимальных параметров в 2D и при необходимости более детально изучая оптимальный режим в 3D. Основная цель 3D моделирования заключалась в изучении влияния конечного угла между осями сталкивающихся лазерных импульсов как на полную эффективность генерации ТГц излучения, так и на диаграмму его направленности, что необходимо для правильного размещения детекторов этого излучения в эксперименте. 3D расчёты показали, что изменения эффективности и углового распределения излучения на удвоенной плазменной частоте при запланированном в эксперименте угле столкновения 50 с хорошей точностью согласуются с предсказаниями теоретических вычислений в дальней зоне источника.

## **Иллюстрации, визуализация**

В ходе выполнения проекта были разработаны численные коды на основе метода частиц в ячейках, позволяющие моделировать лабораторные эксперименты по генерации мощного терагерцового излучения при столкновении в газовой струе двух фемтосекундных лазерных импульсов. Использование двумерных моделей позволяет рассматривать исследуемый процесс на большом масштабе, в то время как полная трёхмерная модель даёт возможность уточнить полученные результаты и рассмотреть те эффекты, которые невозможно описать в аксиально-симметричной или плоской геометрии. Чтобы понять, насколько сильно эффективность схемы и угловое распределение генерируемого излучения чувствительны к конечному углу между лазерными осями, была использована

полная 3D модель.

Результаты расчётов представлены на рисунке 1. Из рисунка видно, как распространяется электромагнитное излучение, а с помощью созданной диагностики было рассчитано распределение и величина его мощности.

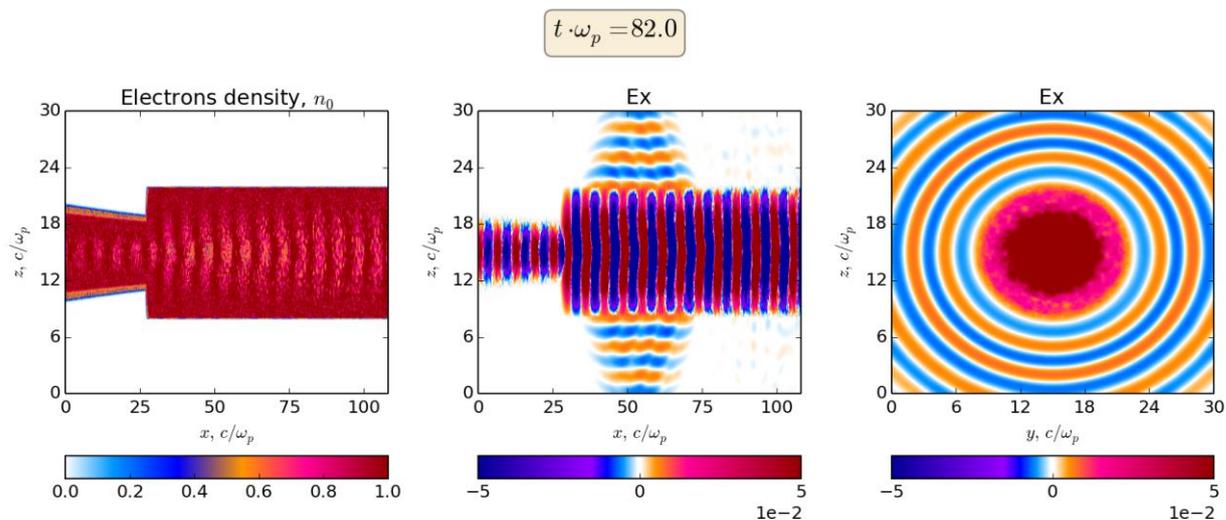


Рисунок 1. Полный 3D расчёт столкновения лазерных импульсов, направленных под углом. Слева направо – 1. Центральный срез плотности  $n_0$  электронов в плоскости  $x$ - $z$ , 2. центральный срез  $x$ -компоненты напряжённости электрического поля в плоскости  $x$ - $z$ , 3. центральный поперечный срез  $x$ -компоненты напряжённости электрического поля в плоскости  $y$ - $z$ . Размеры представлены в  $c/\omega_p$ , где  $c$  – скорость света,  $\omega_p$ , плазменная частота для плотности  $n_0$

#### **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.

#### **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, V.I. Trunov. Optimal synchronization of laser pulses in THz generation scheme with colliding plasma wakes // Physics of Plasmas, 2021, v. 28, issue 1, DOI: 10.1063/5.0029848
2. E A Berendeev, I V Timofeev, E P Volchok and V V Annenkov. PIC simulations of high-power THz radiation produced by the collision of profiled plasma wakefields // J. Phys.: Conf. Ser. 2028 012008 (2021)

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