

Introduzione alle tecniche di simulazione Particle In Cell (PIC) per accelerazione di elettroni e di ioni da interazione laser-plasma

Paolo Tomassini

Head of the ELI-NP Simulation Group

ELI-NP, I.DED, Magurele (Romania)



Il gruppo e' parte del dipartimento **LDED** (Direttore: **Domenico Doria**)



Theory@LDED

Group Coordinator
P. Tomassini

Teoria/simulazioni
principalmente per il
dipartimento LDED

- Fisica Nucleare
- Interazioni laser-solido
- Laser Wake Field
Acceleration
- Particelle secondarie



Paolo Tomassini
Head of Research



Jerry
Joung Researcher



Vojtech Horny
Joung Researcher



Dragana Dreghici
Ph. D. student



Bogdan Corobean
Ph. D. student



Federico Avella
Ph. D. student

*Co tutored with L.Gizzi (INO)

Il SG@ELI-NP “Simulation Group of the ELI-NP pillar” e’ stato creato (insieme agli altri gruppi interdipartimentali) in Marzo 2023 per iniziativa del **Direttore Scientifico, V. Malka**

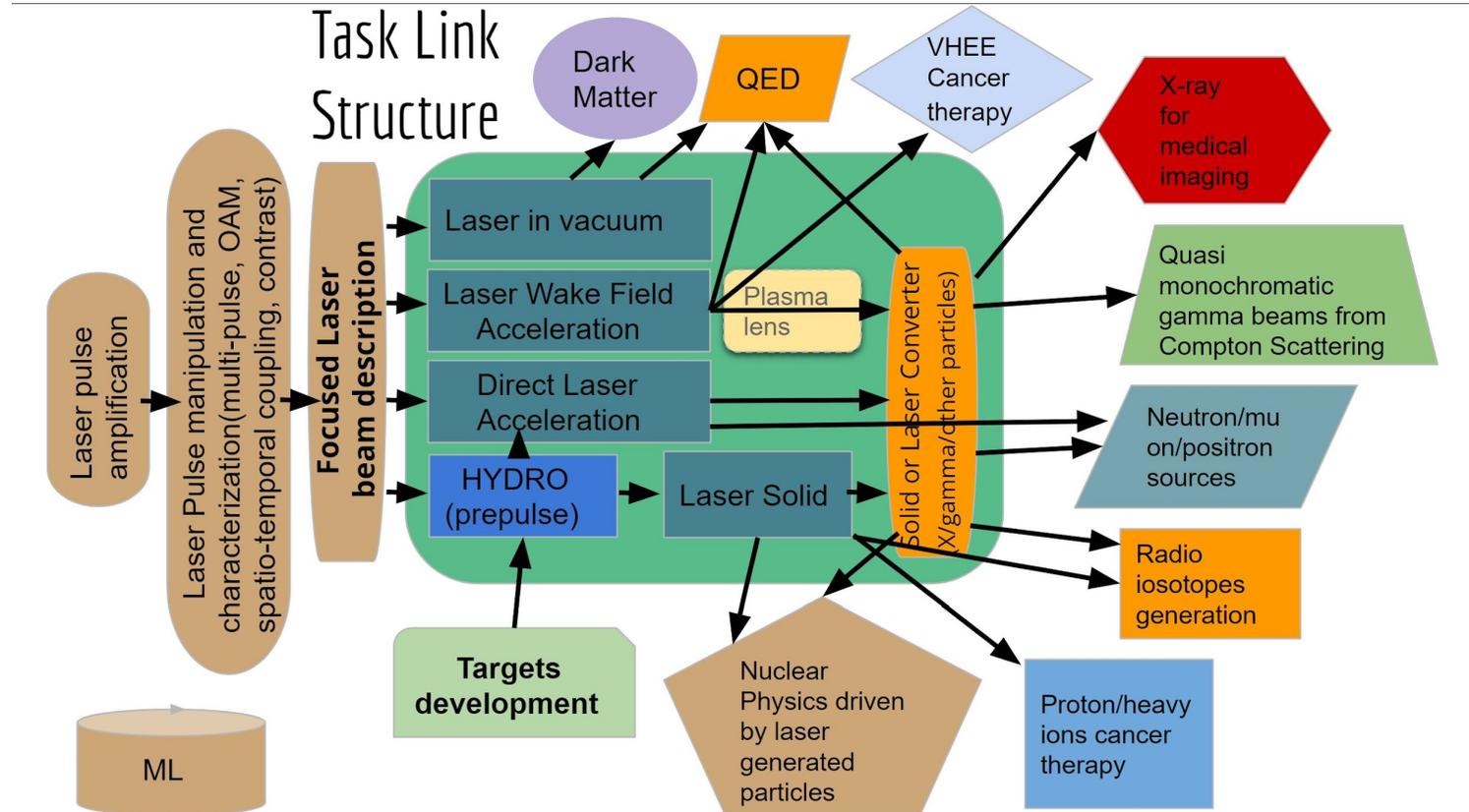
**Coordinatore:
P. Tomassini**

Simulazioni integrate
(start-to-end) per tutto
ELI-NP



Name	Dep	Role	Activities	Links
Ioan Dancus	LSD	CSI	Ray Tracing, laser optimization	
Daniel Ursescu	LSD	CSI	Ray tracing and spatio-temporal propagation	
Razvan Dabu	LSD	CSI	Nonlinear optics	
Maria Talposi	LSD	PhD stud.	Spatio/temporal propagation	
Iulia Maria Zai	Target Lab	PhD stud.	Target design with DFT	
Stefania Ionescu	Target Lab	PhD stud.	Structured targets fabrication	
Paolo Tomassini	LDED	CSI	LWFA, DLA, laser-solid, X/gamma via TS	
Klaus Spohr	LDED	CSI	NP with laser-plasma	
Mihail Cernaianu	LDED	CSIII	Experimental Laser-Target interface , hydro	
Vojtech Horny	LDED	CSIII	LWFA, Hybrid LWFA/PWFA, DLA, X/gamma via	
Chien Jen Yang	LDED	CSIII	Laser solid, X/gamma, NP	
Bogdan Corobean	LDED	PhD stud.	Laser-solid, hydro	
Dragana Dreghici	LDED	PhD stud.	Laser solid, X/gamma, NP	
Dragos Papescu	LDED	Engineer	Machine learning for optimization, interpolation	
Rares Iovanescu	LDED	PhD stud.	2D LWFA sim	
Jian Fuh Ong	LGED	CS	Laser-solid, hydro, high pressure	
Stefan Ataman	LGED	CSIII	Link to theory	
Vadim Munteanu	LGED	Master stud	Machine learning oriented to LWFA	
Andrei Berceanu	LGED	CSIII	LWFA, PWFA, Betatron, Machine Learning	
Paul Constantin	GDED	CSIII	Monte Carlo for secondary sources	
Andi Cucoanes	GDED	CSIII	Simulations related to bio applications	
Nicoleta Safca	XRayLab	PhD stud.	Phase contrast imaging	
Dan Stutman	XRayLab	CSI	Phase contrast imaging, Medical Project	

Il SG@ELI-NP “Simulation Group of the ELI-NP pillar” e’ stato creato (insieme agli altri gruppi interdipartimentali) in Marzo 2023 per iniziativa del **Direttore Scientifico, V. Malka**



Interne

16xV100 32Gb GPU cluster (LGED)

4xA100 80Gb GPU cluster (LDED)

} **Attualmente
disponibili**

IN ARRIVO (~1y): 44xH100 (4TB memoria totale):

2 mesi: 12xH100 80Gb

8 mesi: 32xH100 80Gb

Esterne

EuroHPC Regular Access Call (KAROLINA, Rep. Ceca):

[19,200,000 CPUhours + 1,280,000 GPUhours]



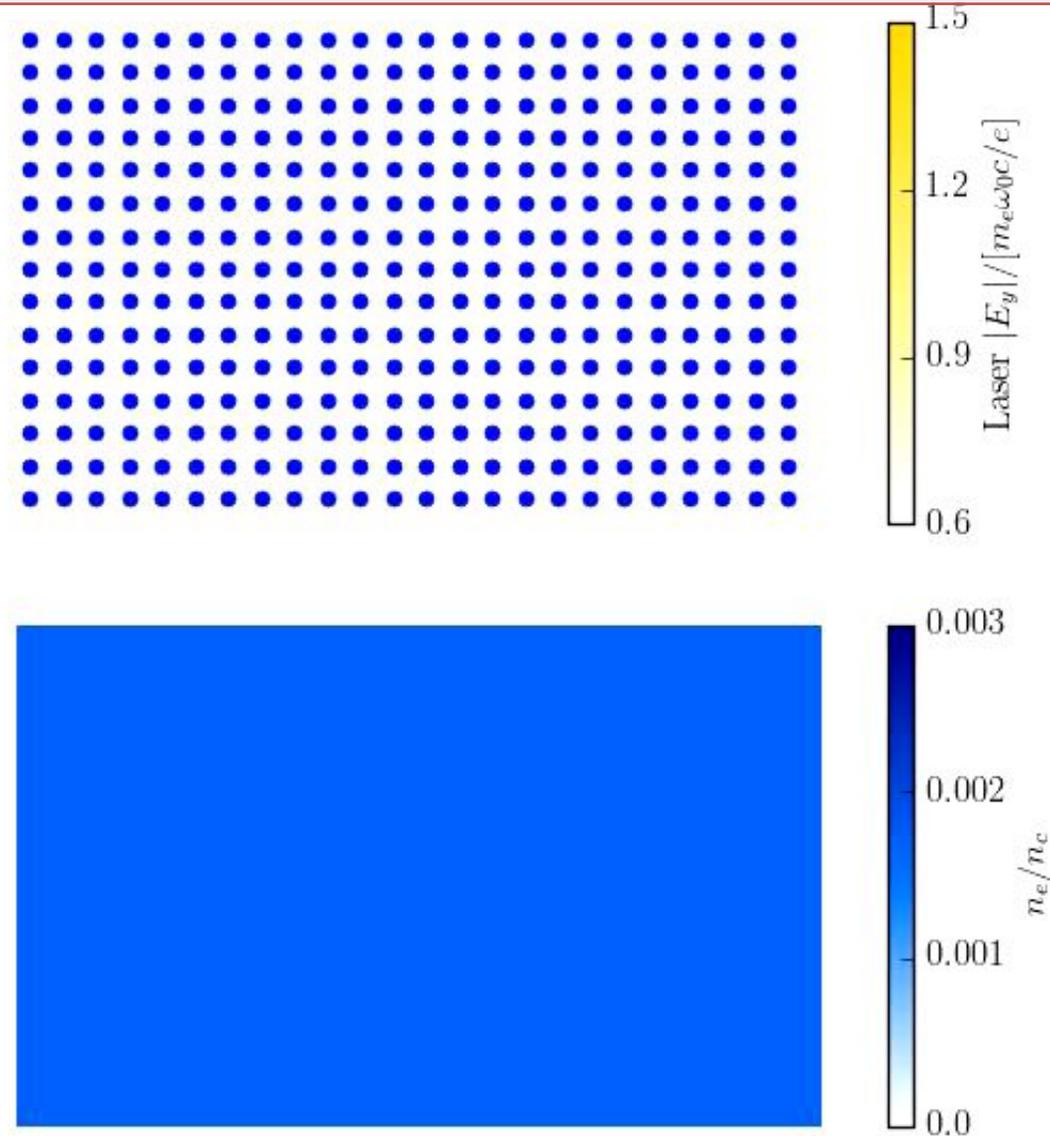
Perche' e' fondamentale avere delle (buone) simulazioni...

1. E' possibile predire (ovviamente con un certo grado di approssimazione) il risultato degli esperimenti che verranno svolti a I-LUCE **e dimensionare i rivelatori**
2. E' possibile **ottimizzare il punto di lavoro** (ad es. pressione del gas-jet, lunghezza focale della parabola, posizione del fuoco...)
3. A posteriori, e' possibile confrontare i dati sperimentali con le simulazioni ed **avere un supporto** (piu' o meno solido in base alla qualita' delle simulazioni) **per l'interpretazione dei dati.**
4. In molti casi e' possibile attivare/disattivare processi fisici nelle le simulazioni per poter **isolare facilmente quali di essi hanno un ruolo rilevante** durante gli esperimenti a I-LUCE.

e perche' e' cosi' difficile avere delle (buone) simulazioni

1. **E' molto difficile** avere informazioni sufficientemente accurate della forma (distribuzione dell'intensita') dell'impulso **laser sul fuoco**, "sparo per sparò"
2. **E' difficile** conoscere l'esatta **distribuzione di densita' del bersaglio nel caso di accelerazione di elettroni** (puo' essere fatta con l'interferometria nel caso LWFA), **mentre e' praticamente impossibile** determinare sperimentalmente la mappa di densita'/temperature del plasma **nel caso di interazione laser/solido**
3. **Anche i tool di simulazione hanno le loro limitazioni:** spesso lavorare con una geometria 2D e/o con una risoluzione non elevata sono scelte obbligate in caso di risorse di calcolo limitate.

Esempio di simulazione per LWFA



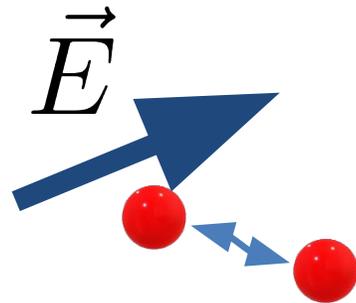
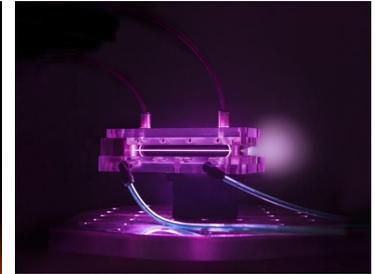
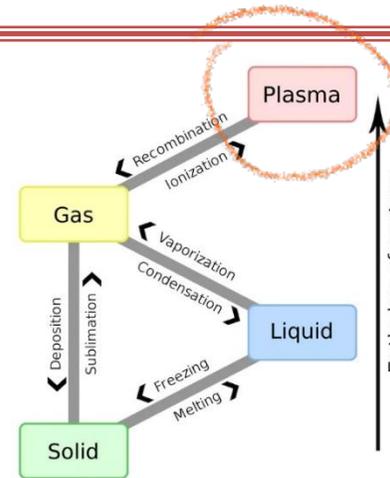
Cosa possiamo simulare con un codice PIC? Particle-In-Cell (Particelle In Celle)

Definizione (rigorosa) dello stato di plasma:

Il plasma e' un gas ionizzato ...

globalmente neutro...

*che mostra **effetti collettivi (?)***



Senza entrare nei dettagli: in un plasma sufficientemente denso e non troppo caldo (come quelli che simuleremo) le cariche libere sono così tante che **le interazioni binarie (carica-carica) sono molto più piccole di quelle collettive efficaci (carica-tutte le altre cariche)**

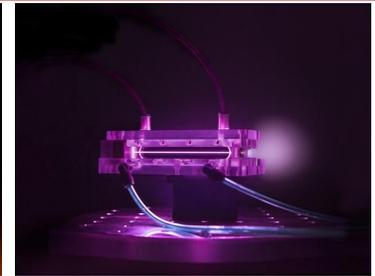
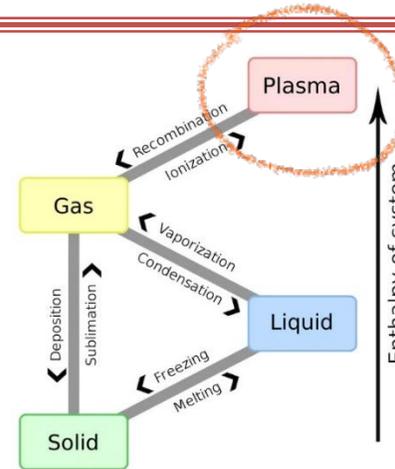
Cosa possiamo simulare con un codice PIC? Particle-In-Cell (Particelle In Celle)

Definizione (rigorosa) dello stato di plasma:

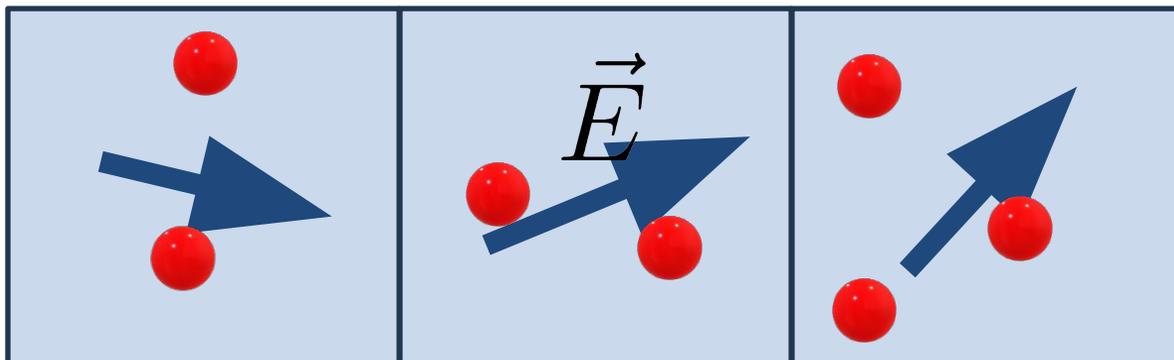
Il plasma e' un gas ionizzato ...

globalmente neutro...

*che mostra **effetti collettivi (?)***



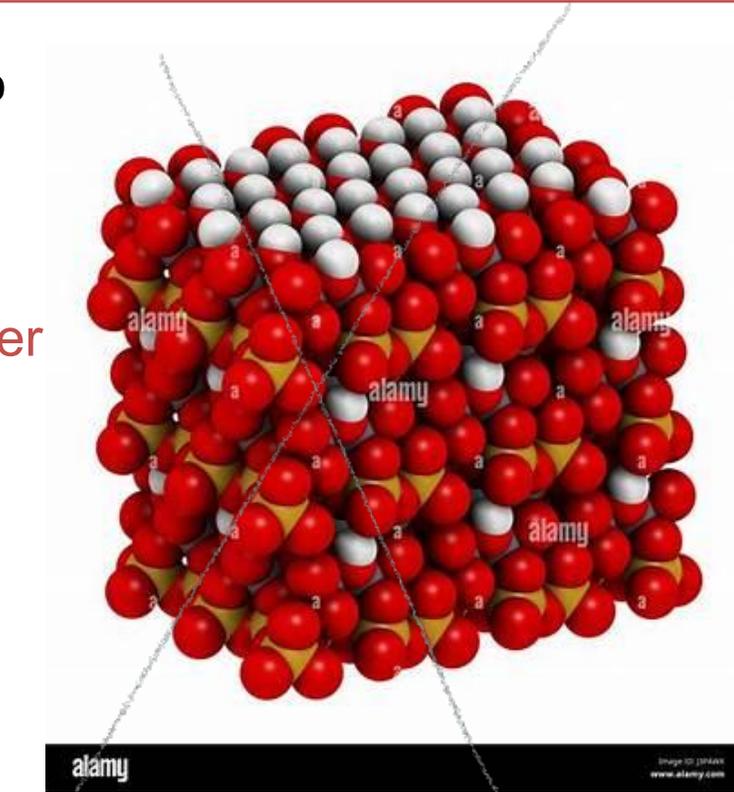
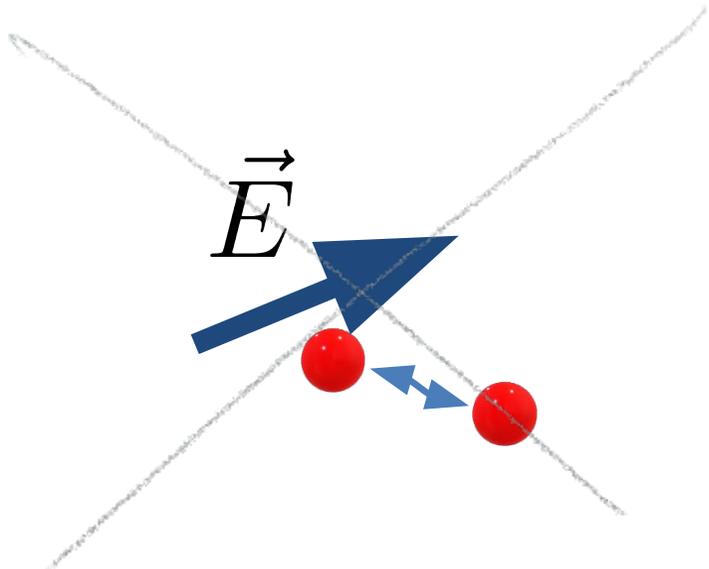
Ha quindi senso dividere lo spazio in celle e calcolare il campo elettrico (e magnetico) collettivi in ciascuna cella



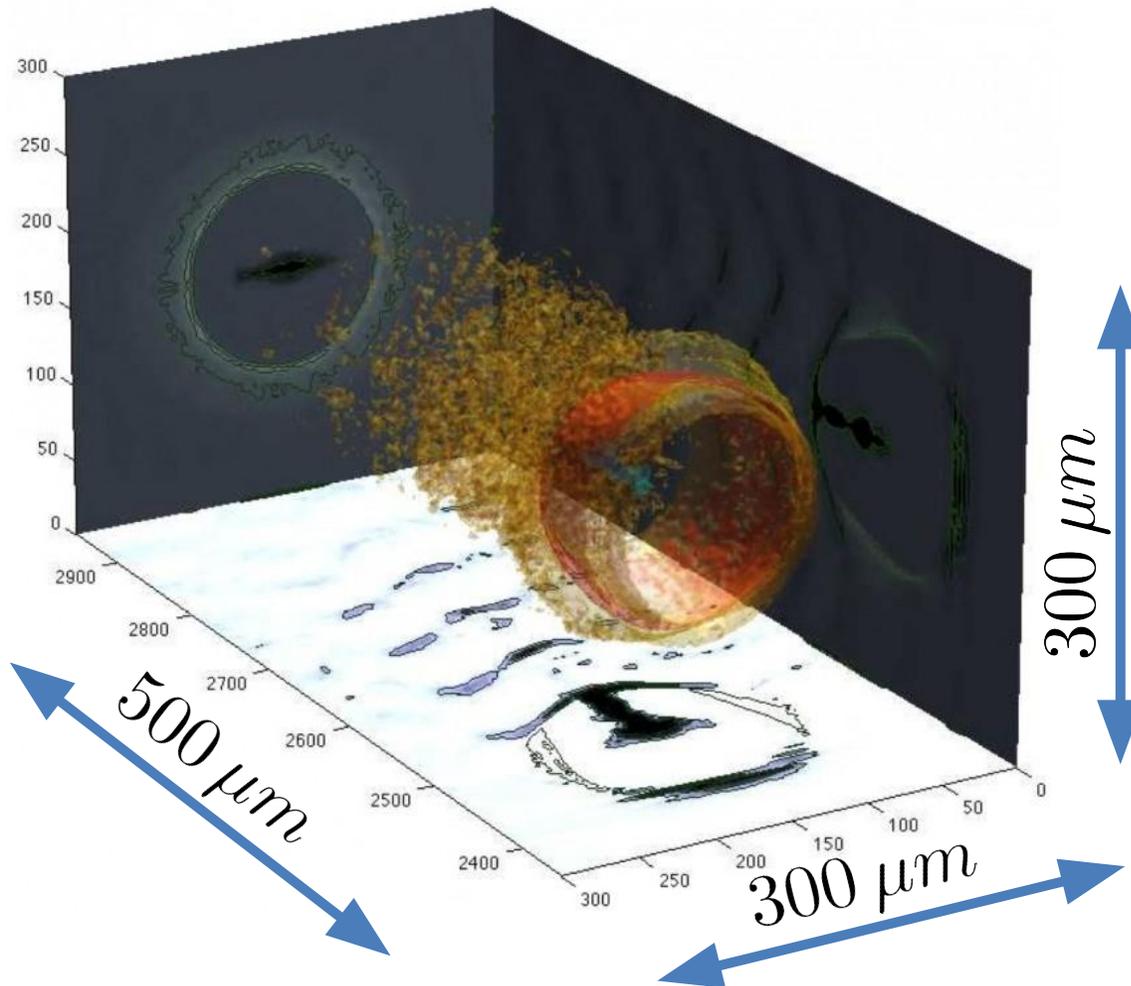
Senza entrare nei dettagli: in un plasma sufficientemente denso e non troppo caldo (come quelli che simuleremo) le cariche libere sono così tante che **le interazioni binarie (carica-carica) sono molto più piccole di quelle collettive efficaci (carica-tutte le altre cariche)**

Le interazioni laser-solido (ad e.s. per accelerazione di ioni) NON possono essere simulate con un codice PIC perche' le interazioni binarie (atomo-atomo o ione-ione) dominano sulle interazioni collettive.

Questo pero' non e' un problema perche' **nella realta'** il preimpulso del laser e' di norma sufficiente per ionizzare parzialmente o completamente il bersaglio, cosi' da poter simulare una interazione laser-plasma.



<https://cuos.engin.umich.edu/researchgroups/hfs/research/theory-and-computation/>



Le particelle da simulare sono davvero tante!

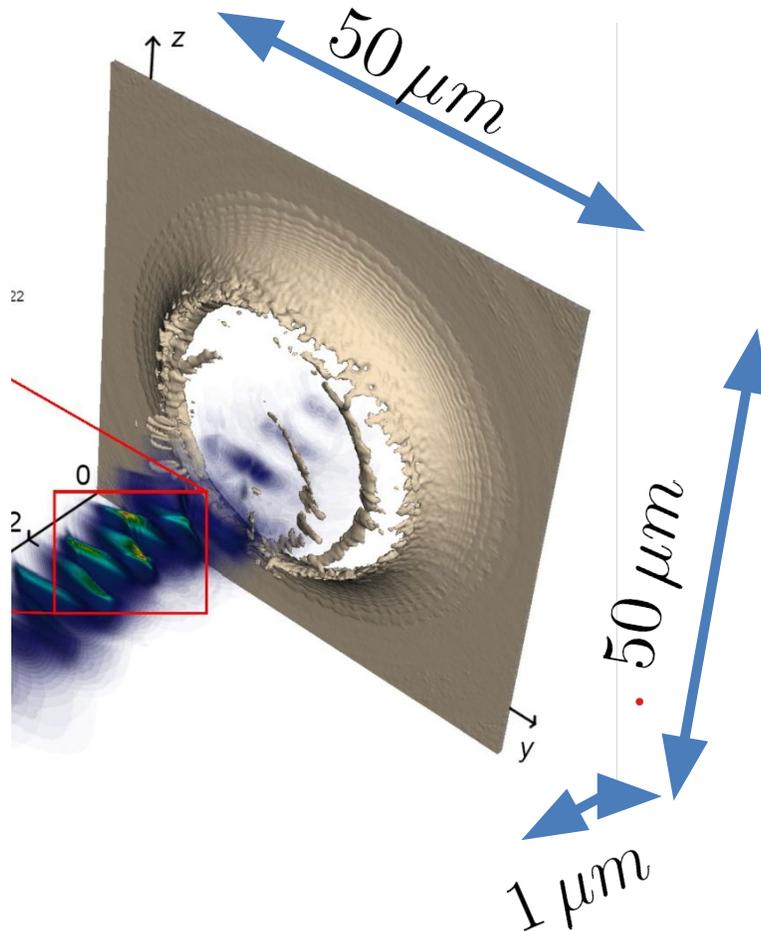
Esempio di simulazione LWFA

$$n_e = 1 \times 10^{17} e^- / cm^3$$

$$N_{simulazione} \approx n_e \times Vol$$

$$\approx 5 \times 10^{12}$$

5000 miliardi di elettroni nel volume da simulare



500 mila milioni di miliardi di elettroni (e 1/10 di ioni) nel volume da simulare

Le particelle da simulare sono davvero tante!

Esempio di simulazione TNSA

$$n_e = 2 \times 10^{23} e^- / cm^3$$

$$N_{simulazione} \approx n_e \times Vol$$

$$\approx 5 \times 10^{14}$$

E' necessario utilizzare una descrizione alternativa delle particelle che sia allo stesso tempo gestibile e accurata

E' necessario utilizzare una descrizione alternativa delle particelle che sia allo stesso tempo gestibile e accurata:



Usiamo la funzione di **DISTRIBUZIONE** delle particelle

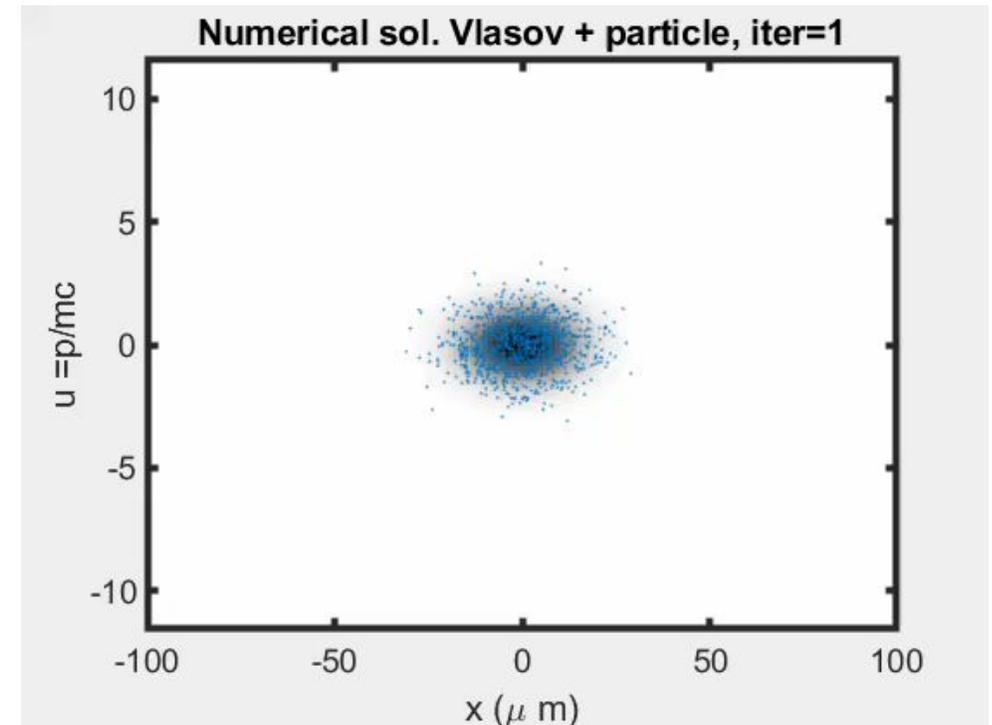
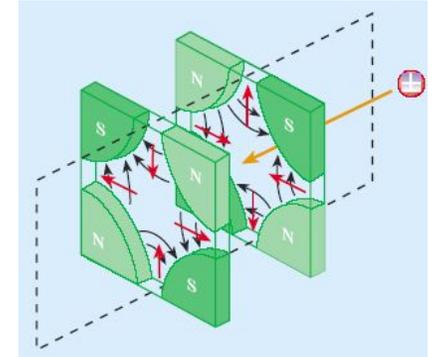
$f(\vec{x}, \vec{p})$ e' la "densita' di particelle con quella posizione quell'impulso"

(APPR) Soddisfa l'equazione di Vlasov

$$\frac{\partial}{\partial t} f + v \partial_x f + F \partial_p f = 0$$

Esempio: elettroni soggetti ad una forza foccheggiante lineare

$$F = -kx$$



$$\partial_t f \simeq \frac{f(t+dt) - f(t-dt)}{2dt}$$

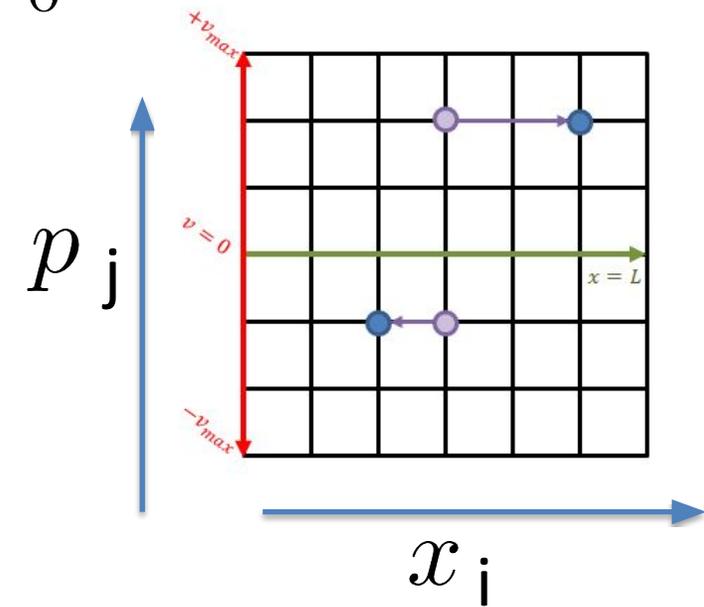
$$\partial_x f \simeq \frac{f(x+dx, p) - f(x-dx, p)}{2dx}$$

$$\partial_p f \simeq \frac{f(x, p+dp) - f(x, p-dp)}{2dp}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f + v \partial_x f + F \partial_p f = 0$$

Differenze Finite (centrate)

$$f(x, p, t) = f(i dx, j dp, k dt) = f(i, j, k)$$

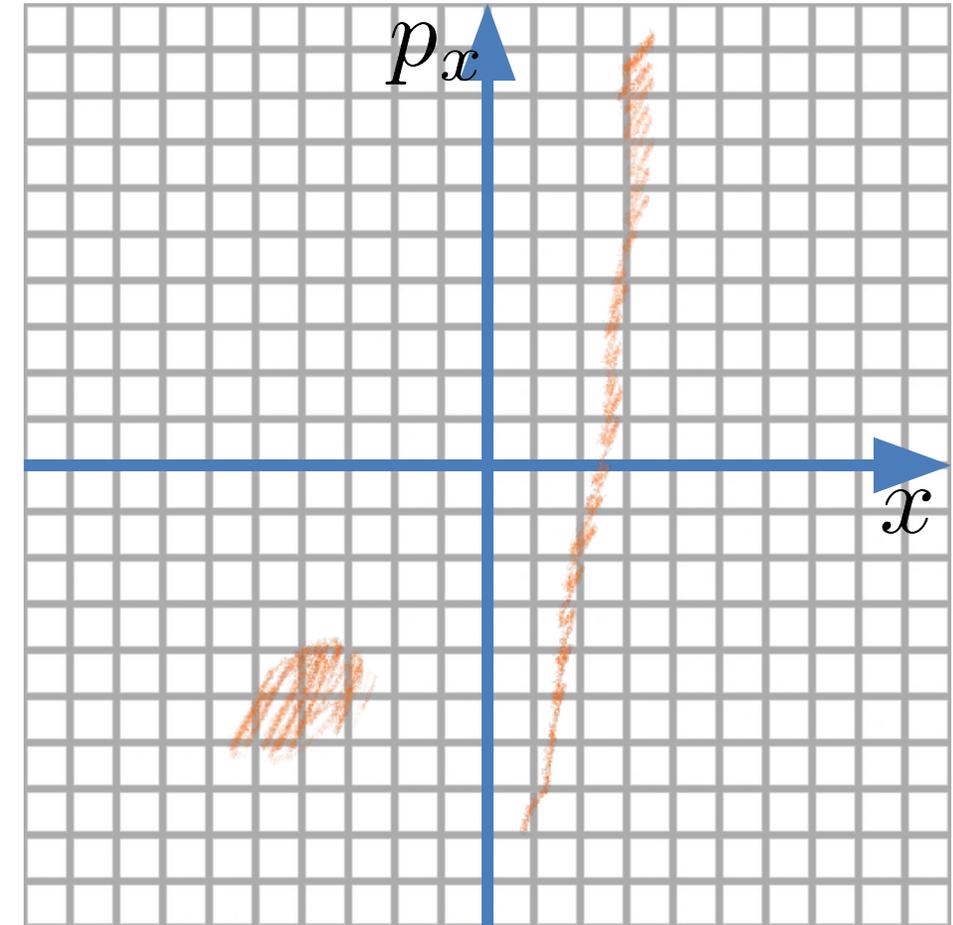


Avanzamento temporale (esplicito)

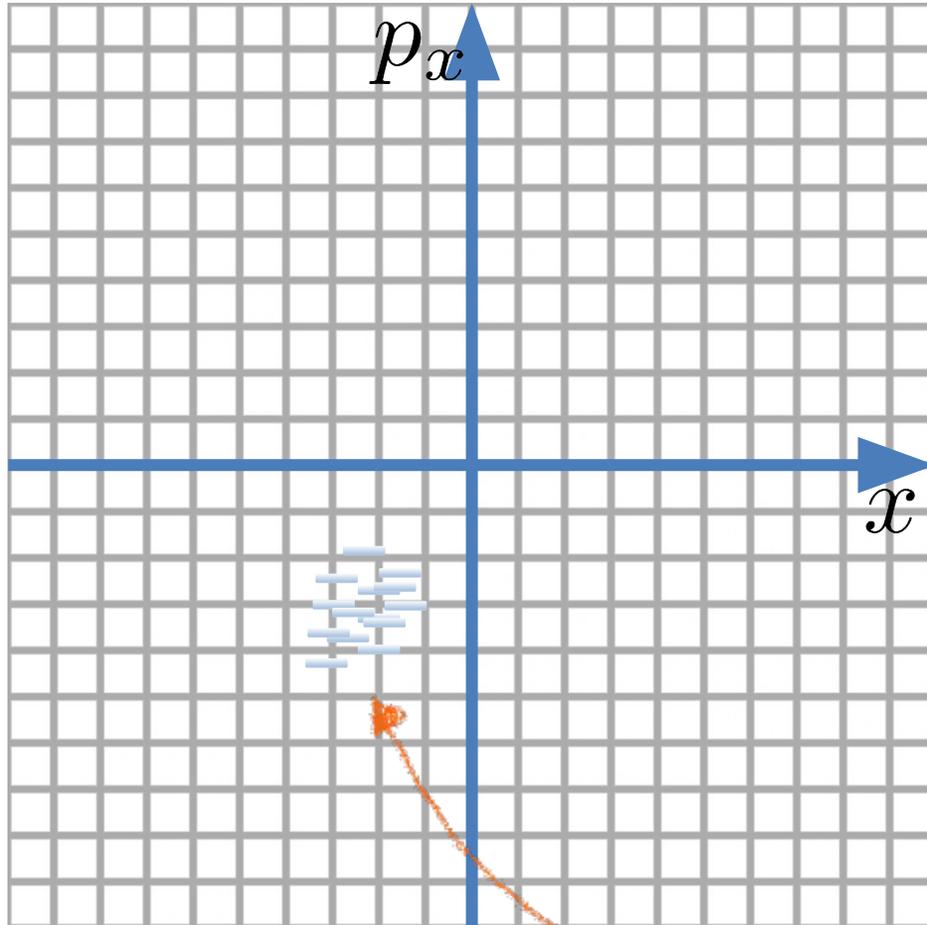
? **Se abbiamo già uno schema che funziona** (cioè la descrizione delle particelle mediante la loro distribuzione nello spazio delle fasi $f(\vec{x}, \vec{p})$ e anche uno schema numerico per seguire l'evoluzione nel tempo di questa distribuzione (vedi slide precedente), **che bisogno c'è di complicare le cose ulteriormente?**



In 1D l'equazione è facilmente risolvibile anche se l'intervallo di impulsi da simulare è ampio, **in 2D-3D abbiamo problemi di memoria. Inoltre buona parte dello spazio è vuoto, quindi lo schema attuale è ampiamente inefficiente**

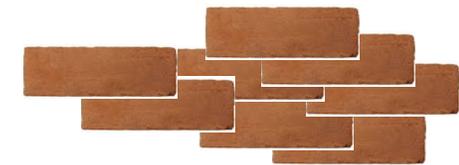
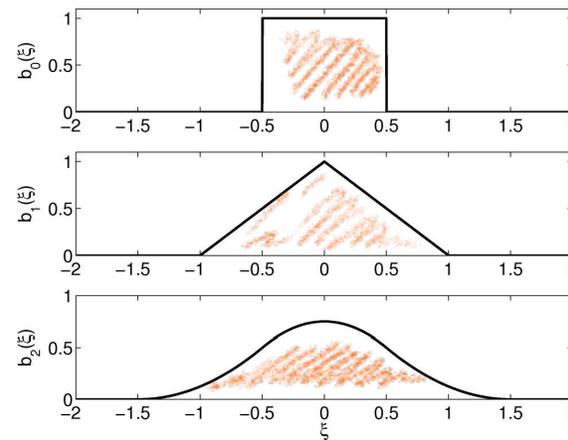


APPR: Teorema di Liouville: il volume occupato dallo spazio delle fasi è costante



In uno schema PIC lo spazio delle fasi e' costruito su "mattoni"  (MACROPARTICELLE), che hanno tipicamente una forma a b-spline in x.

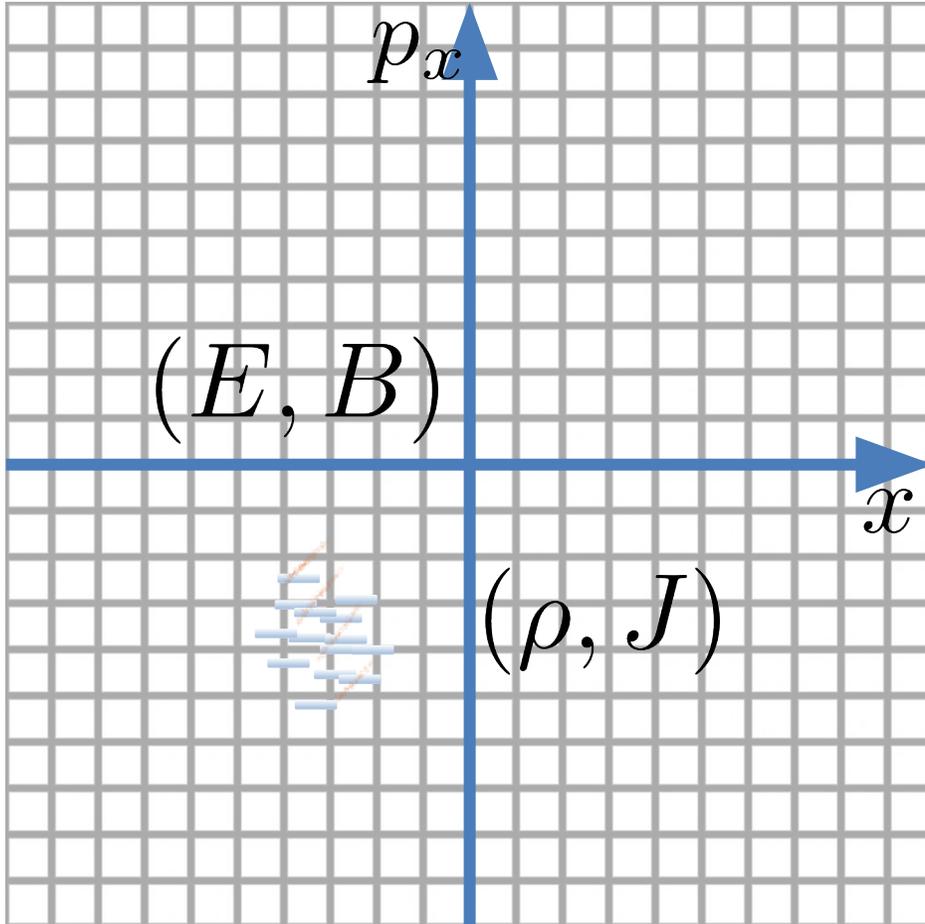
Ogni macroparticella ha impulso (e quindi velocita') definiti e **si muove seguendo le normali leggi del moto di una particella.**



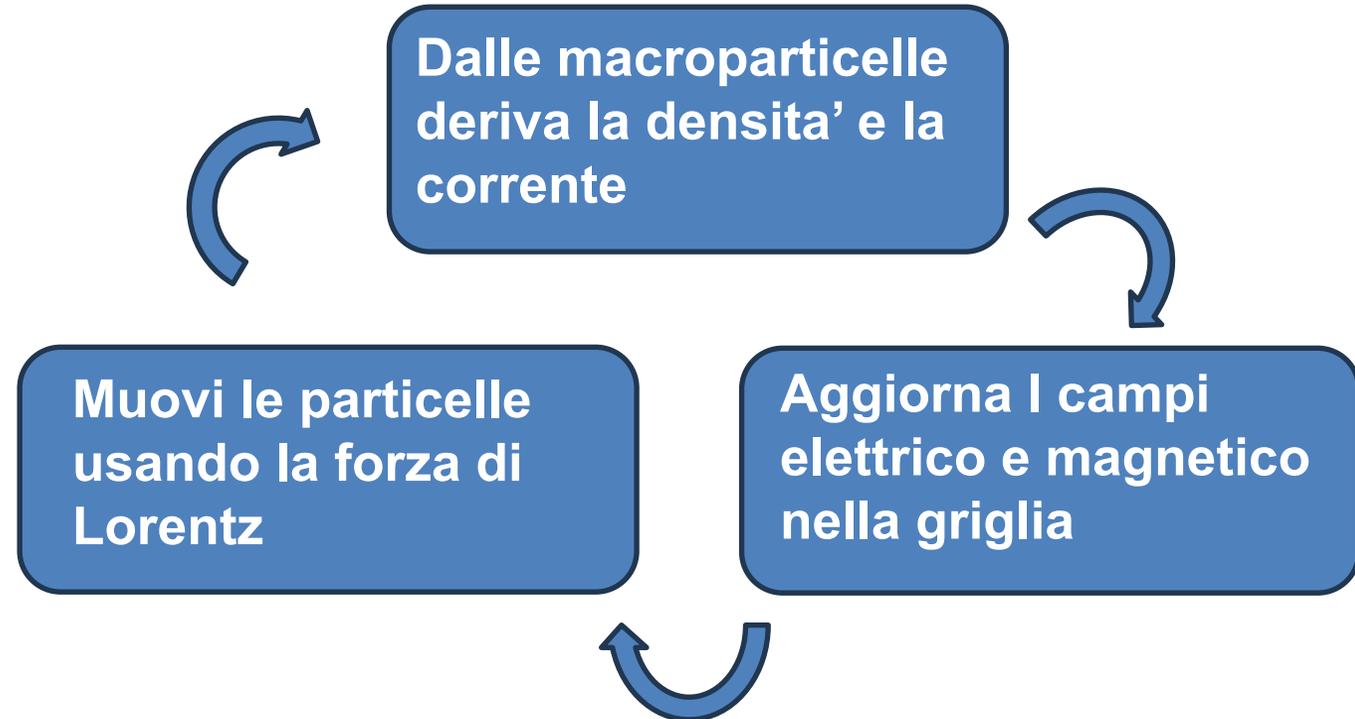
APPROFONDIMENTO:

$$f(x, p) = \sum_i S_i(x, x_i) \delta(p - p_i)$$

Le forme delle macroparticelle piu' usate



Per valutare l'evoluzione temporale con incremento Δt , ad ogni istante:



Finite-difference time-domain (FDTD) Differenze Finite in Dominio Temporale

E' l'analogo dello schema usato per risolvere l'eq. di Vlasov. I campi e le correnti sono in una griglia (1D,2D,3D) e si risolvono le eq. di Maxwell usando le differenze finite

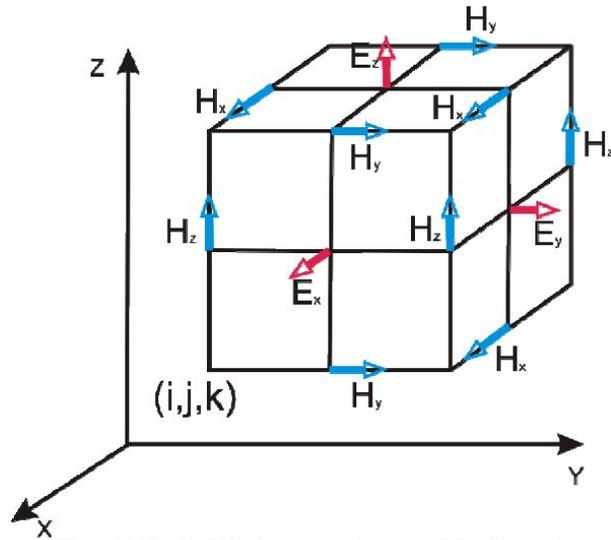
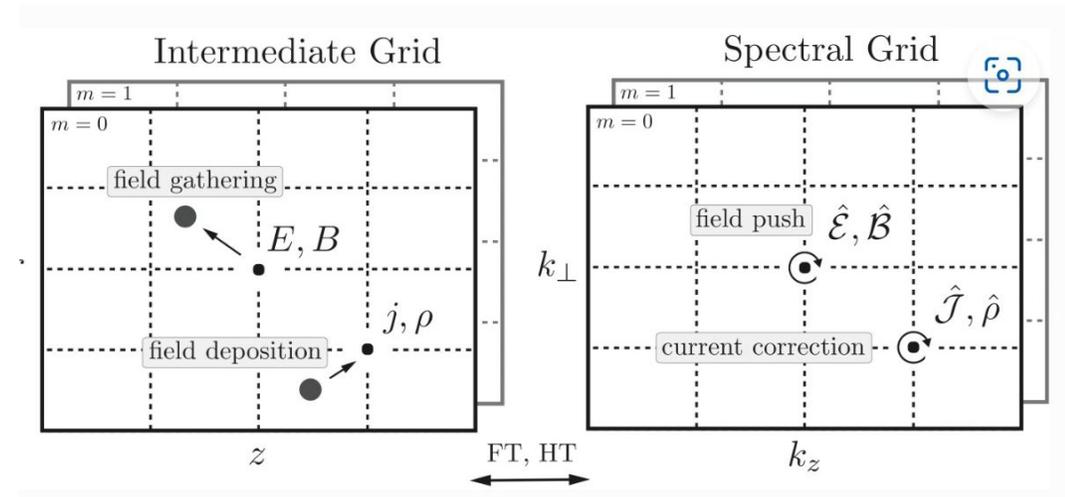
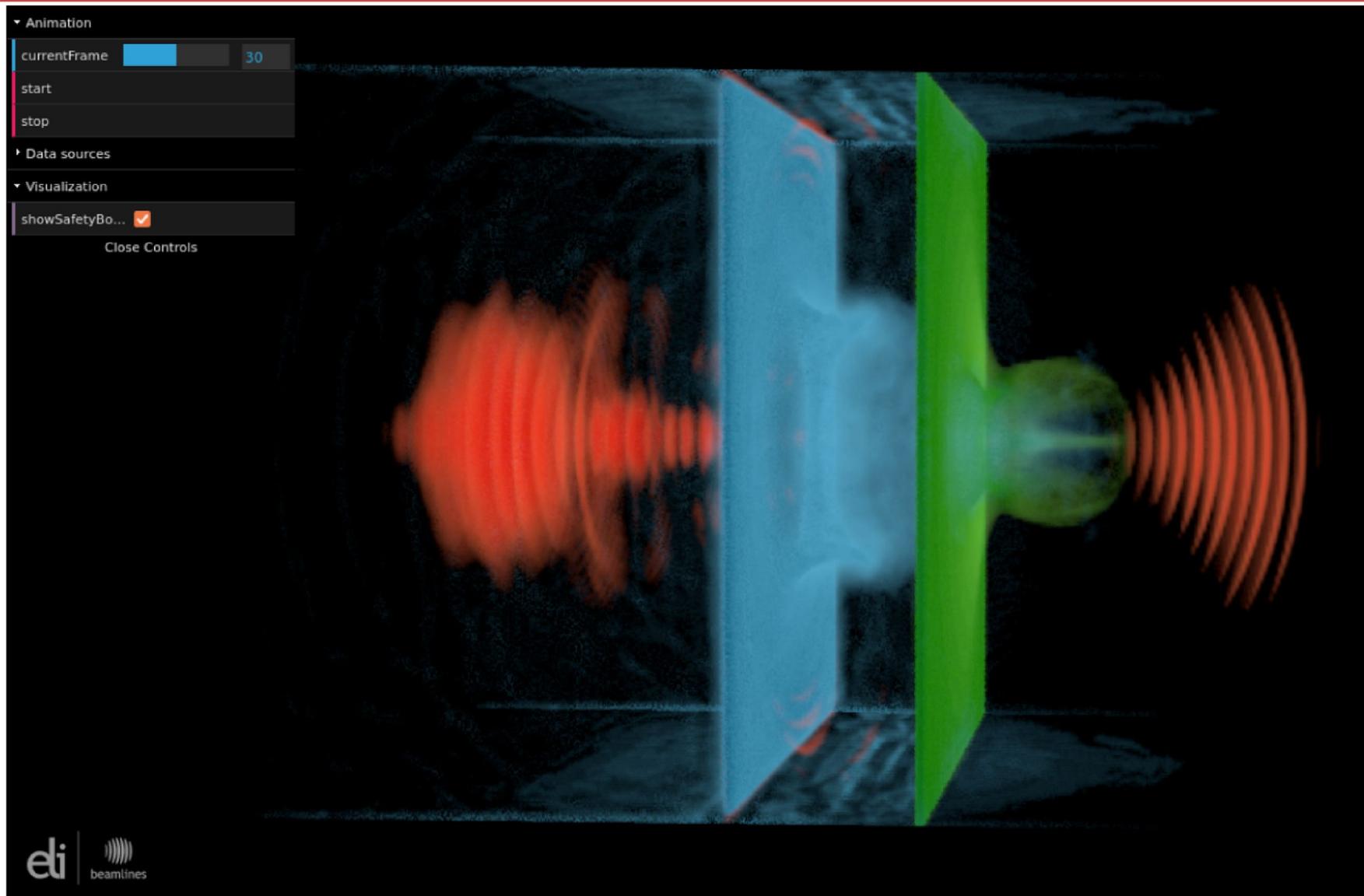


Figure 1. E and H field components in a cubical Yee cell.

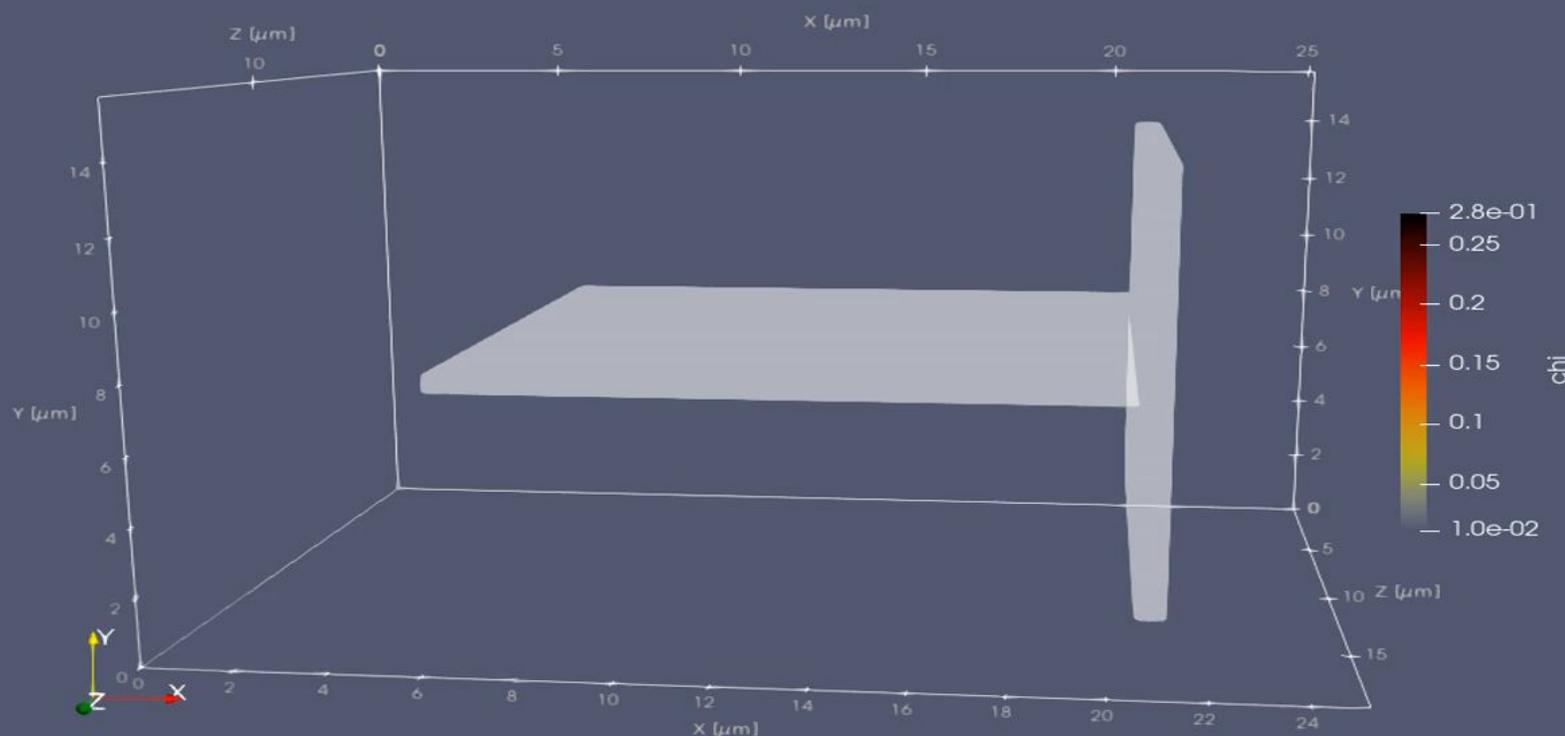
Metodo SPETTRALE o PSEUDOSPETTRALE

Le correnti e i campi sono definiti nel dominio spettrale (in k , non in ω) e si usano metodi spettrali per risolvere le equazioni di Maxwell.



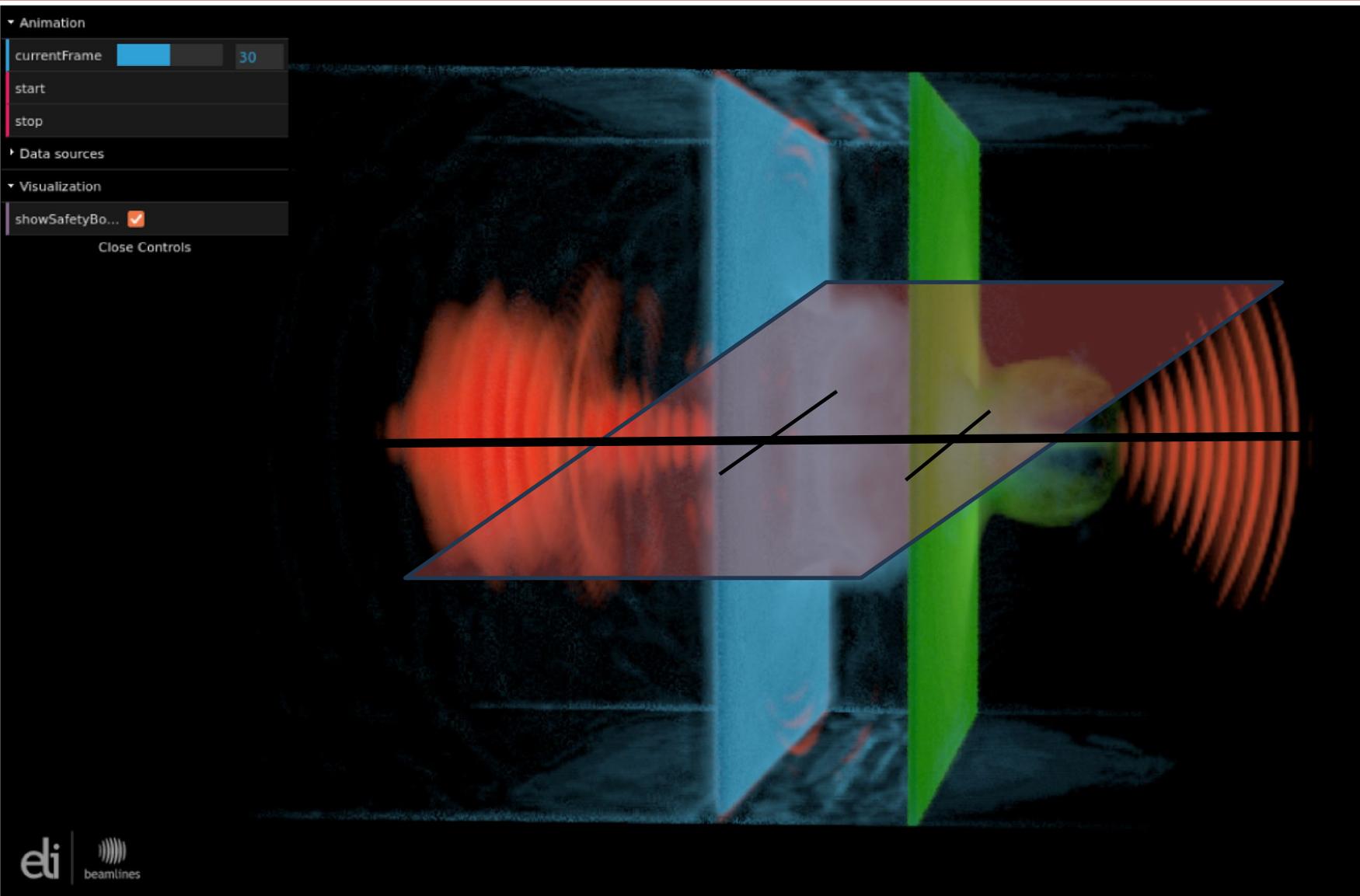


**Estremamente
costosa dal punto
di vista delle
risorse di calcolo,
non tutti i laboratori
possono farle**



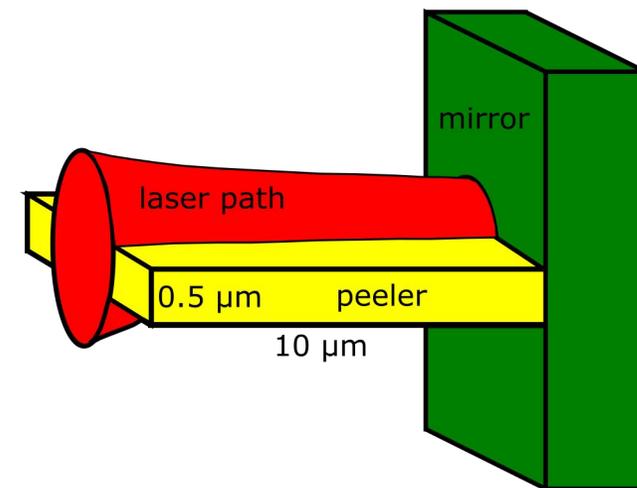
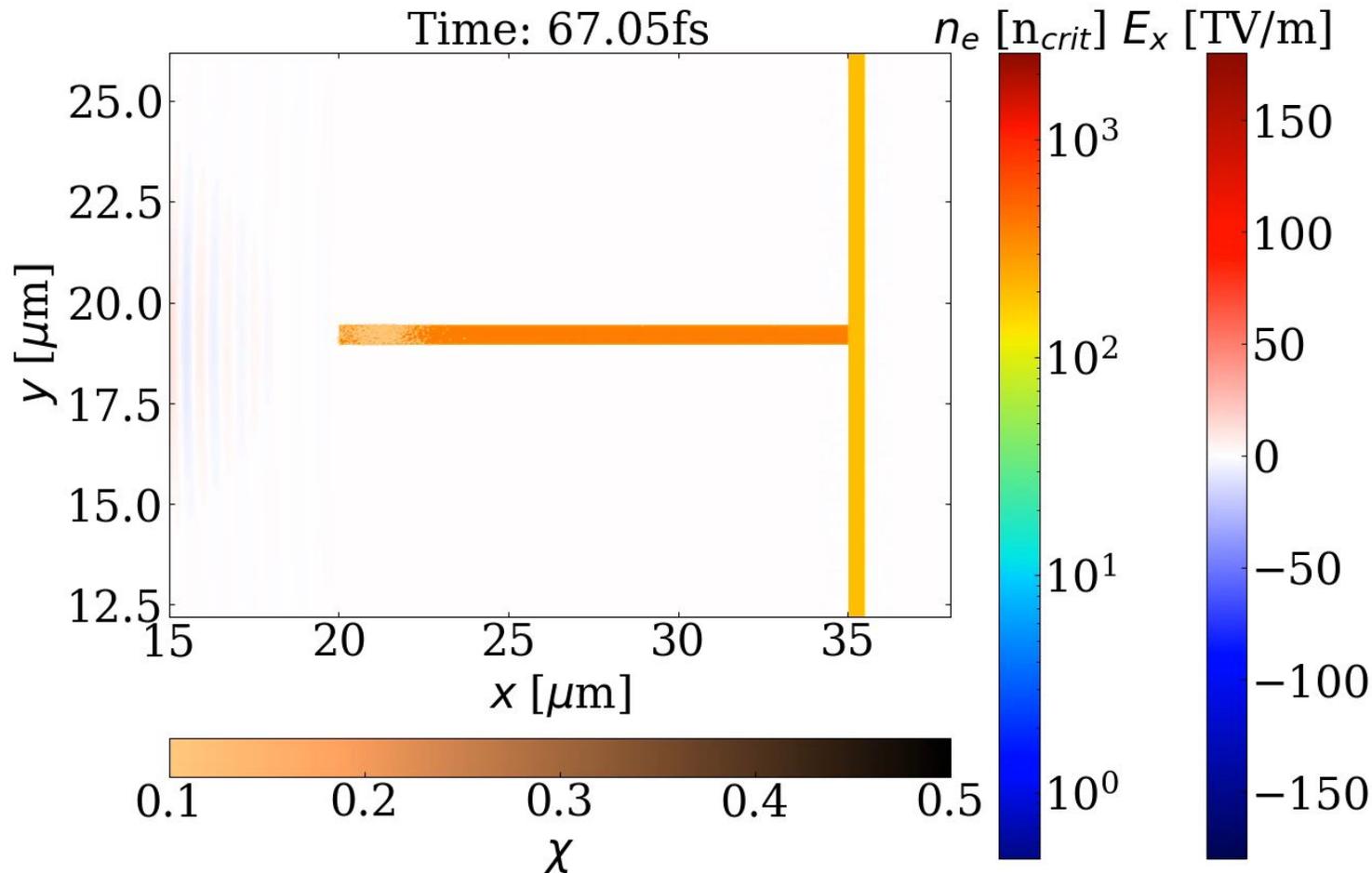
Esempio: Interazione tra un impulso laser di potenza **1PW** con una targhetta di carbonio ultra sottile in geometria Peeler + Plasma Mirror per la generazione di impulsi gamma

*simulation by B. Corobean



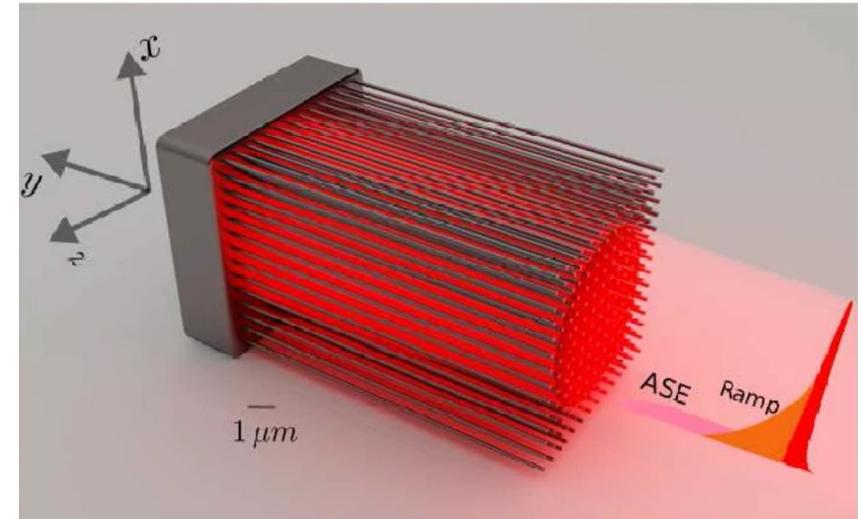
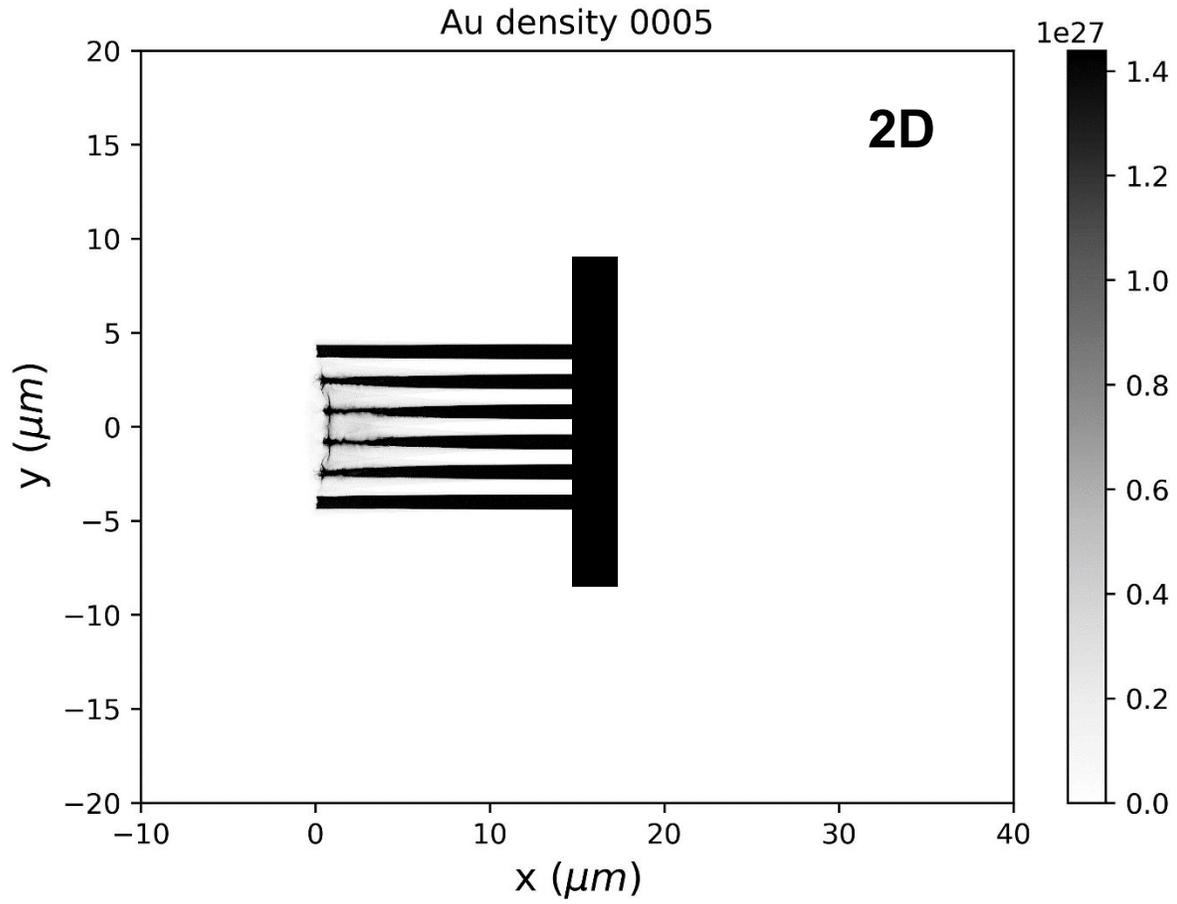
Effettuiamo un taglio 2D del volume e assumiamo che il sistema sia invariante nella direzione mancante (quella verticale in questo esempio)

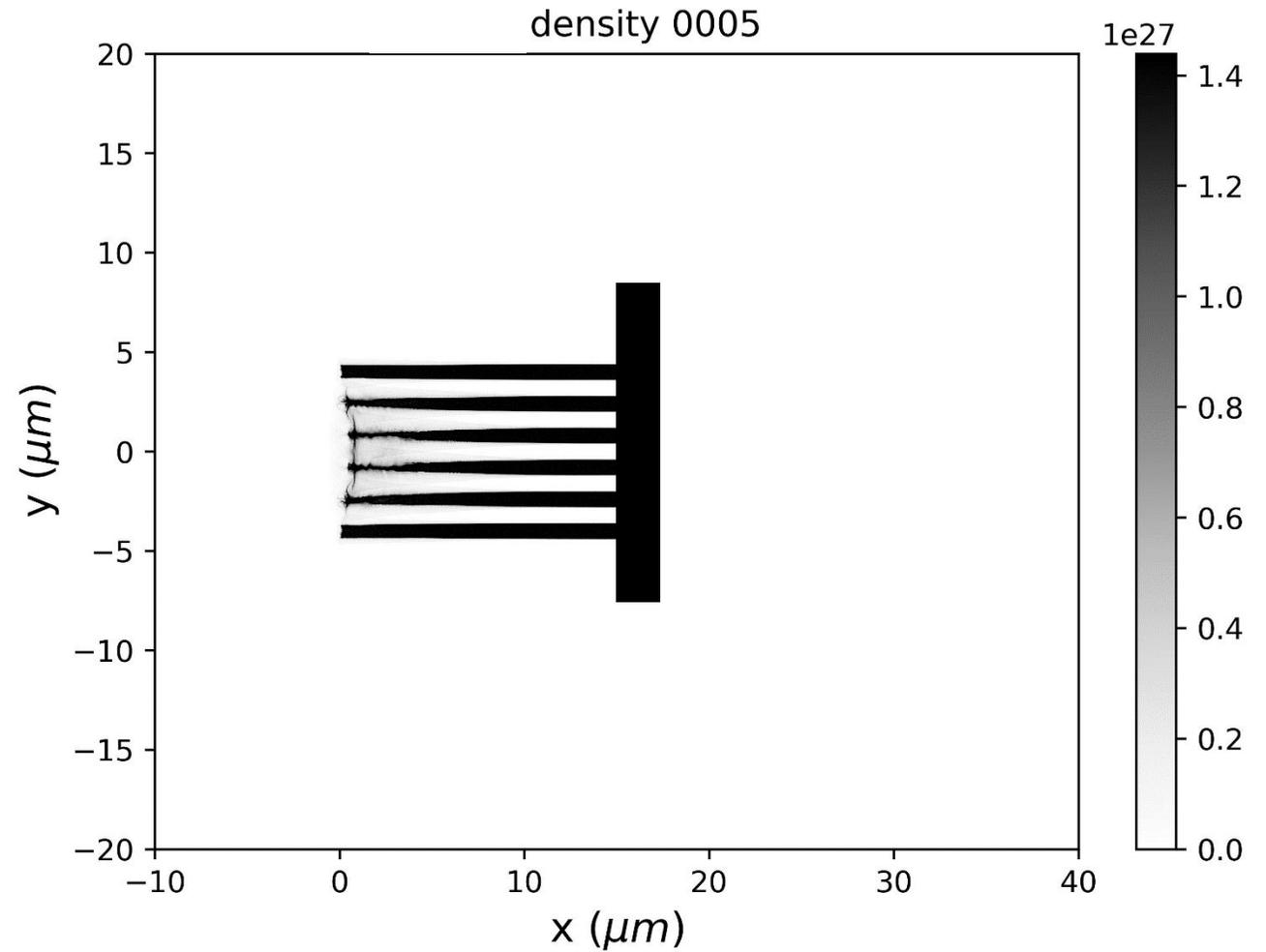
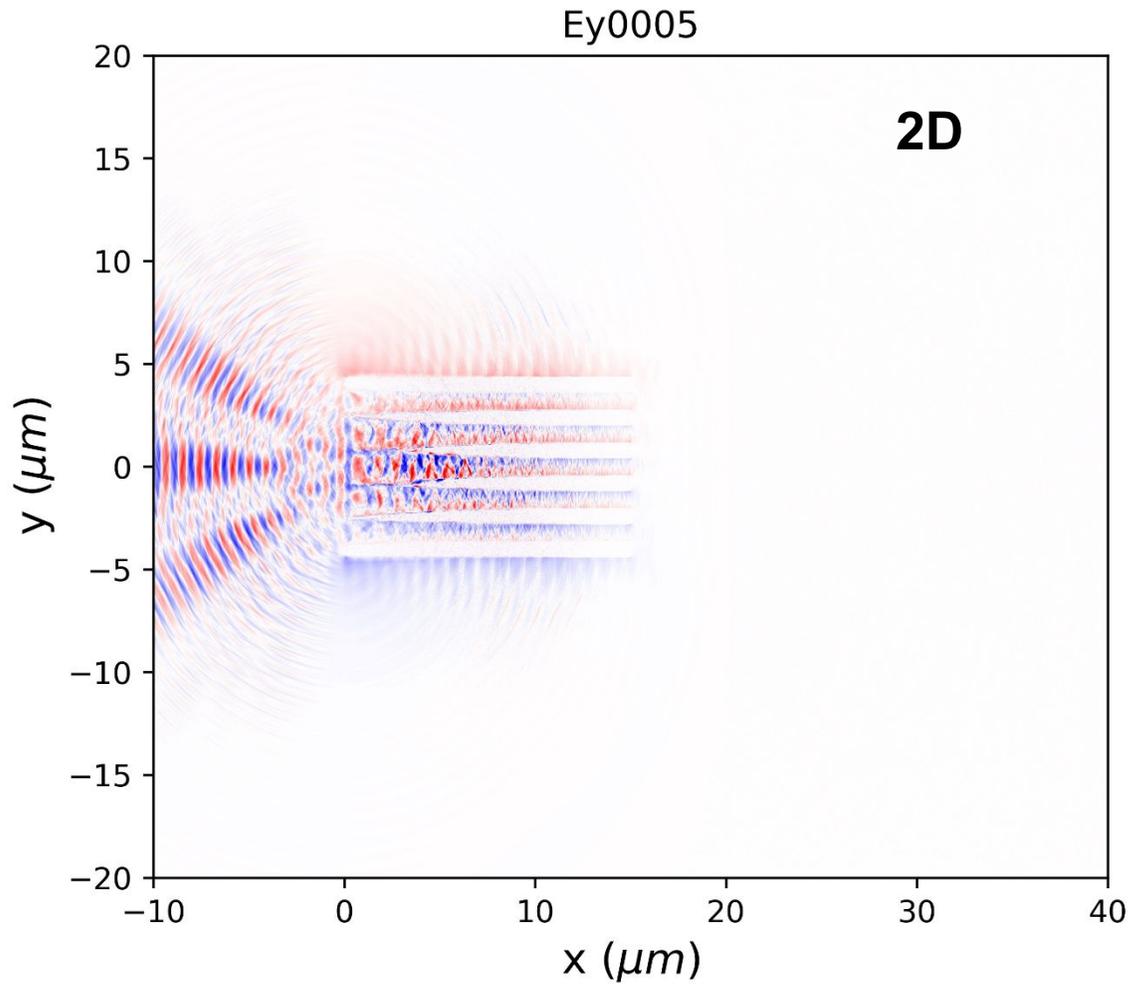
Questo funziona bene se il Sistema non cambia sensibilmente muovendoci in verticale

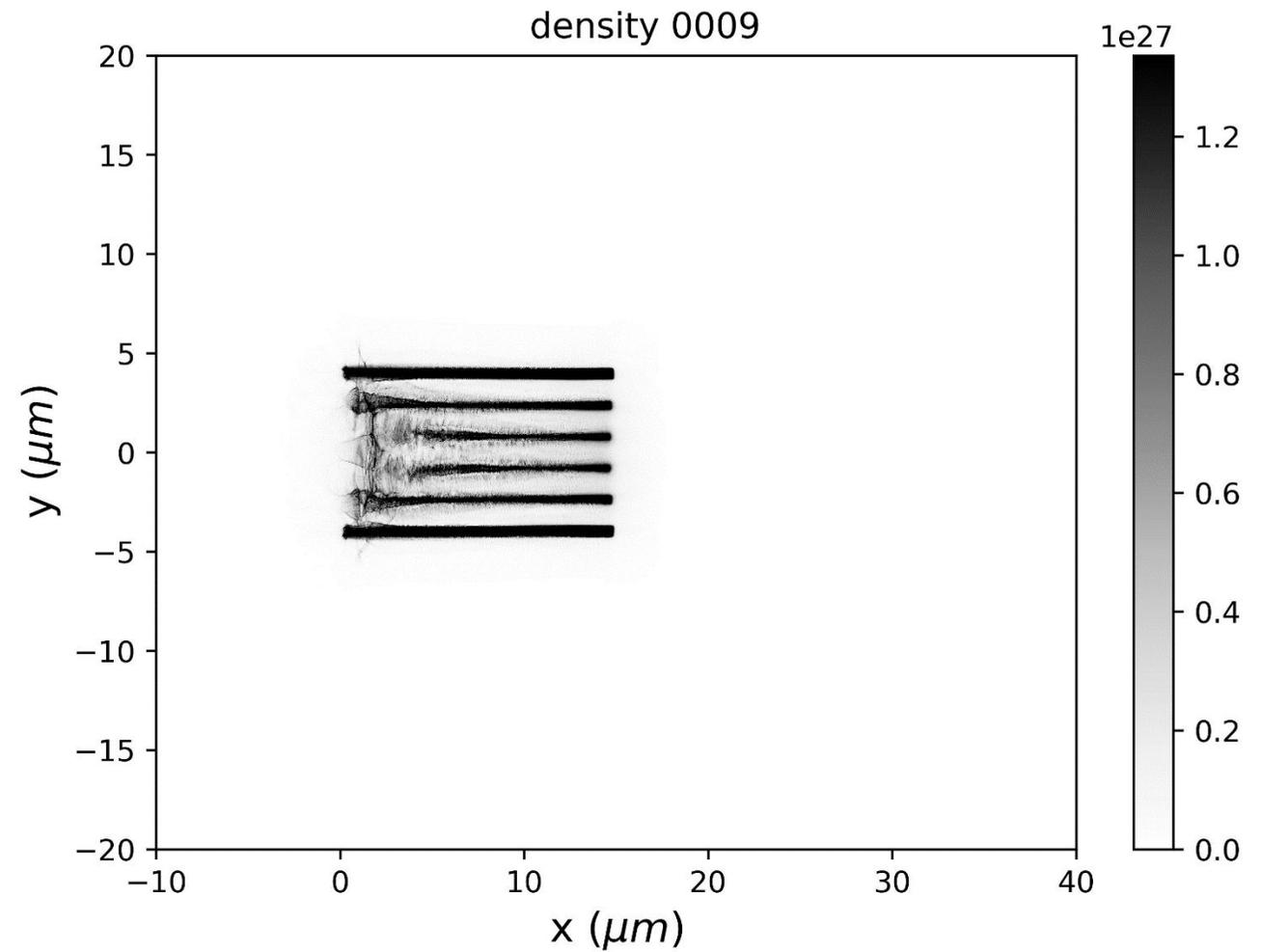
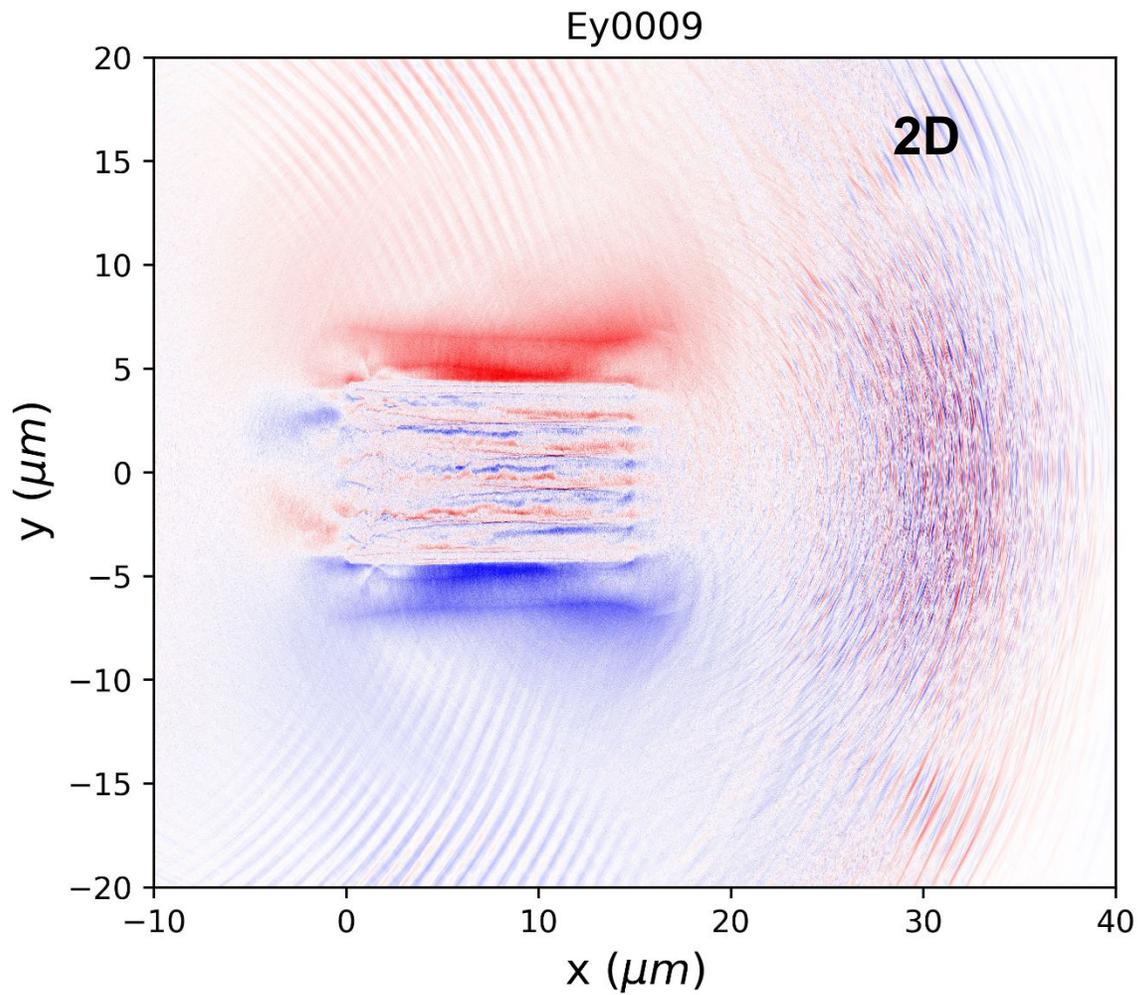


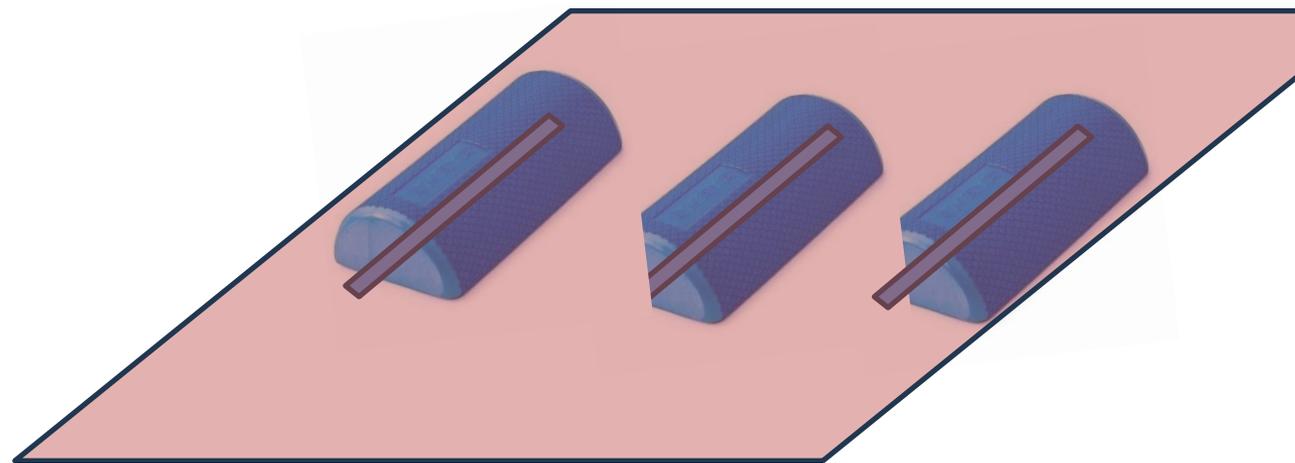
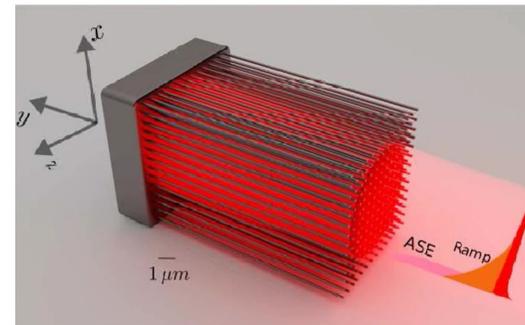
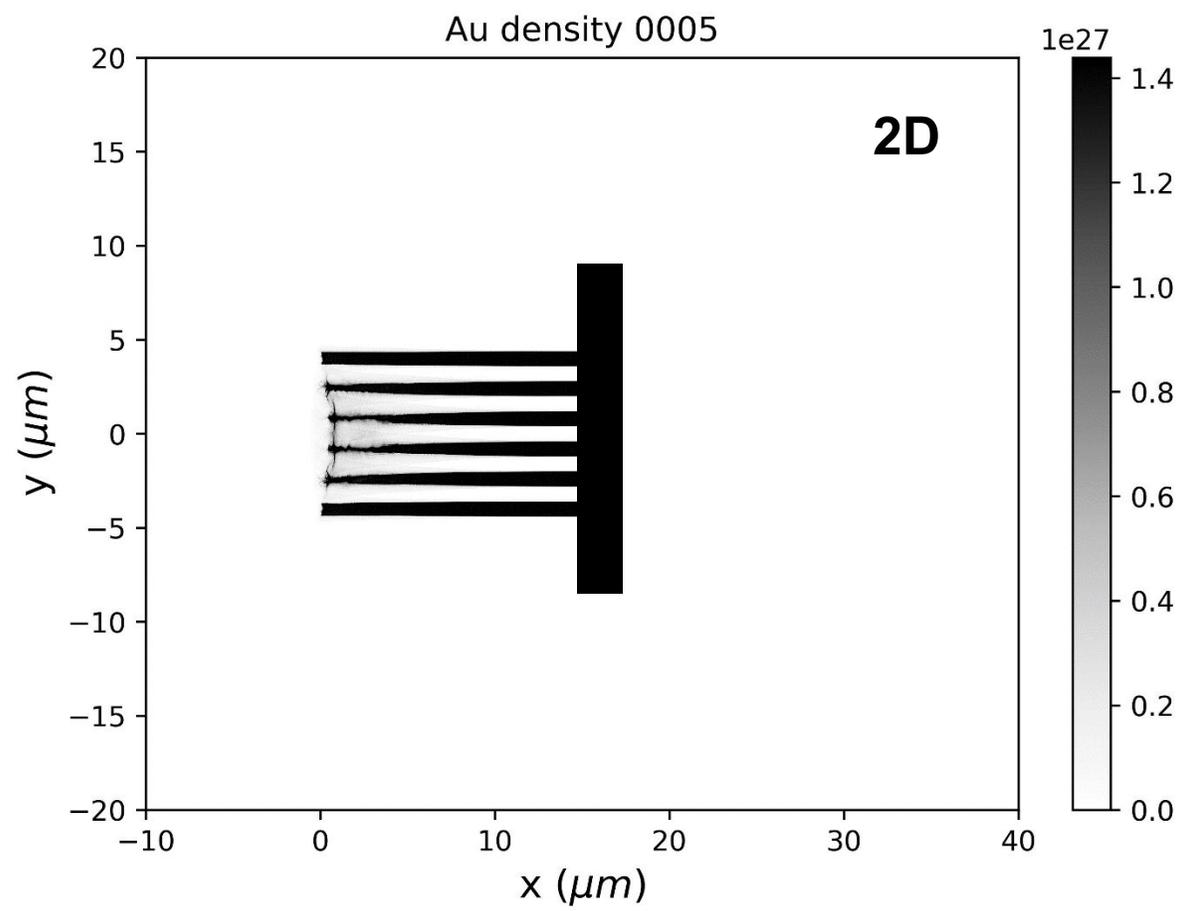
Esempio: Interazione tra un impulso laser di potenza **1PW** con una targhetta di carbonio ultra sottile in geometria Peeler + Plasma Mirror per la generazione di impulsi gamma

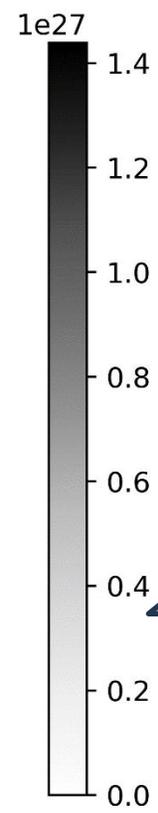
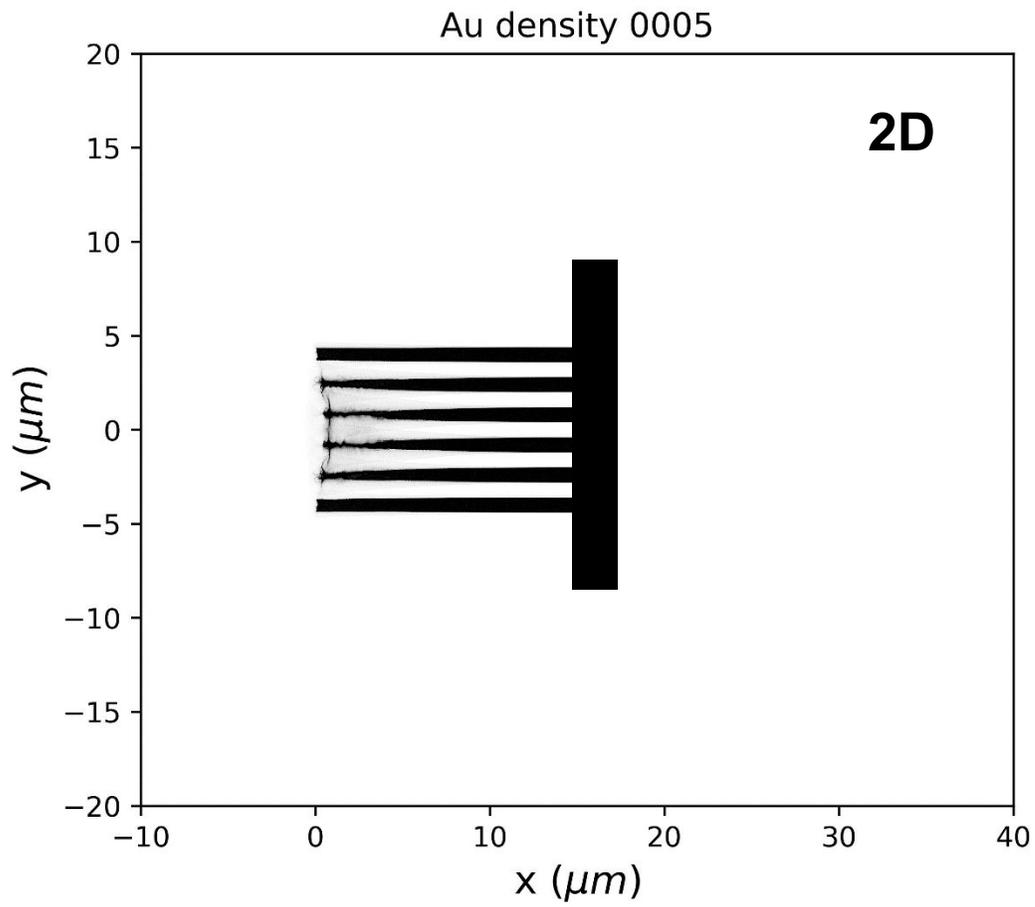
*simulation by B. Corobean



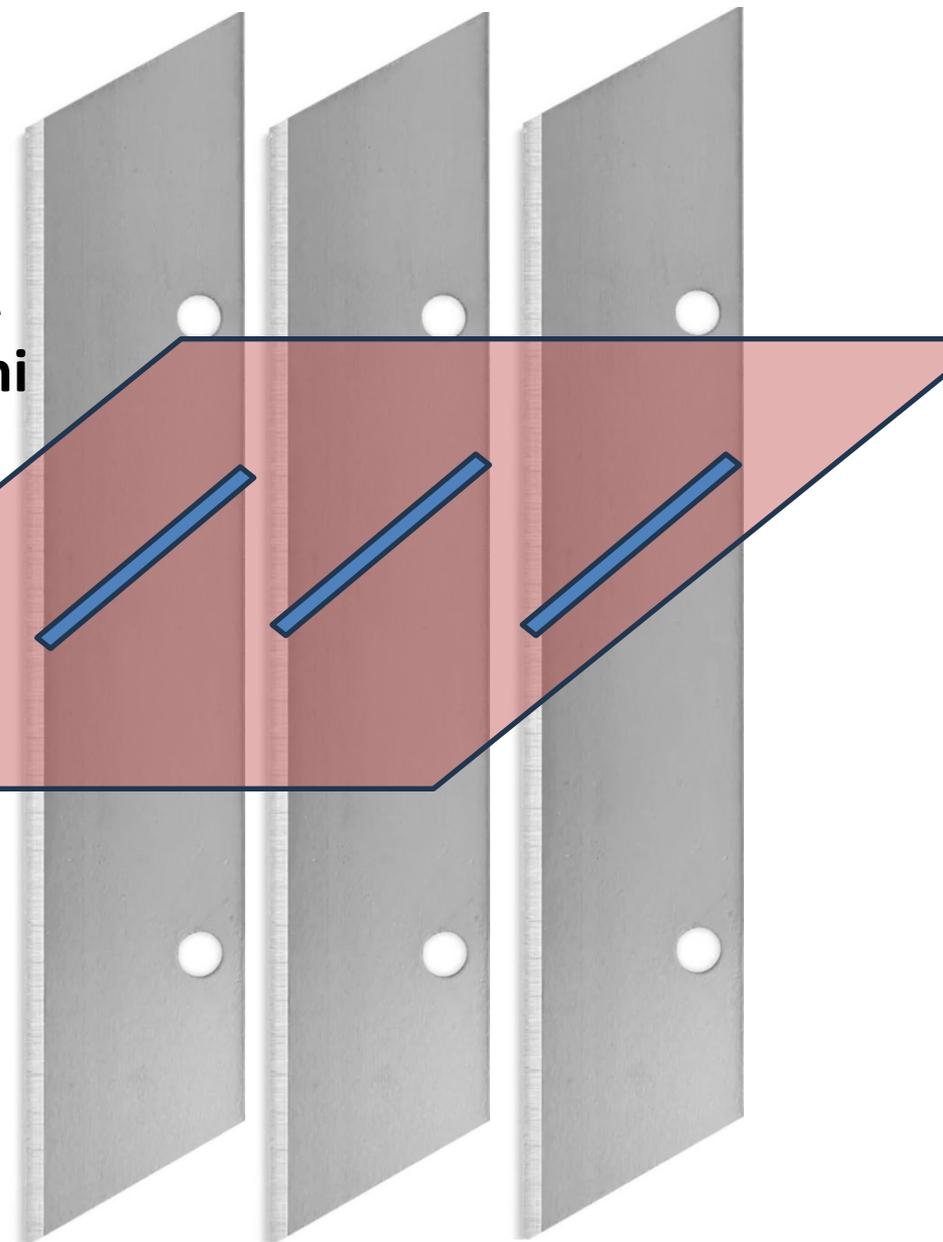


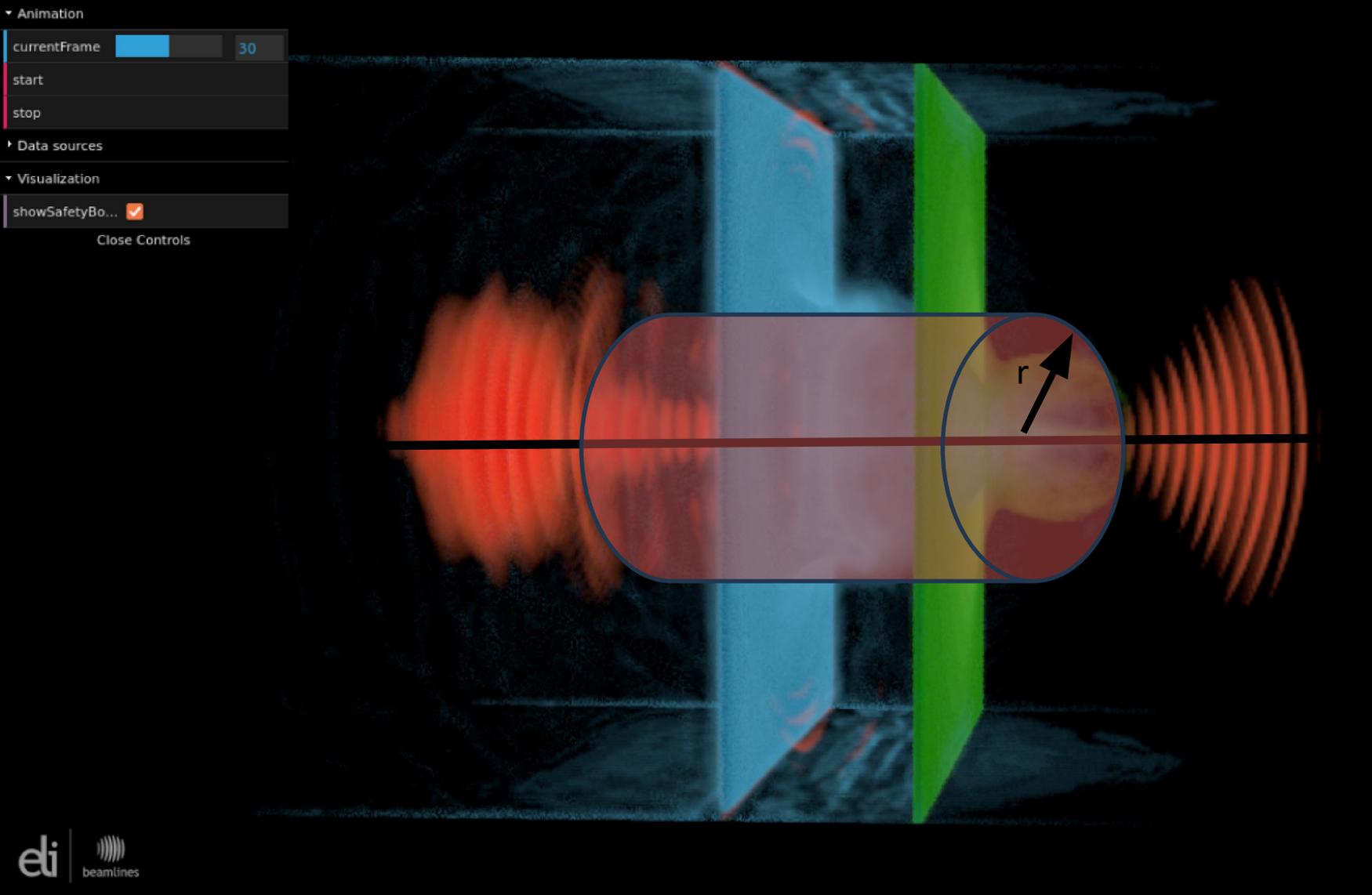






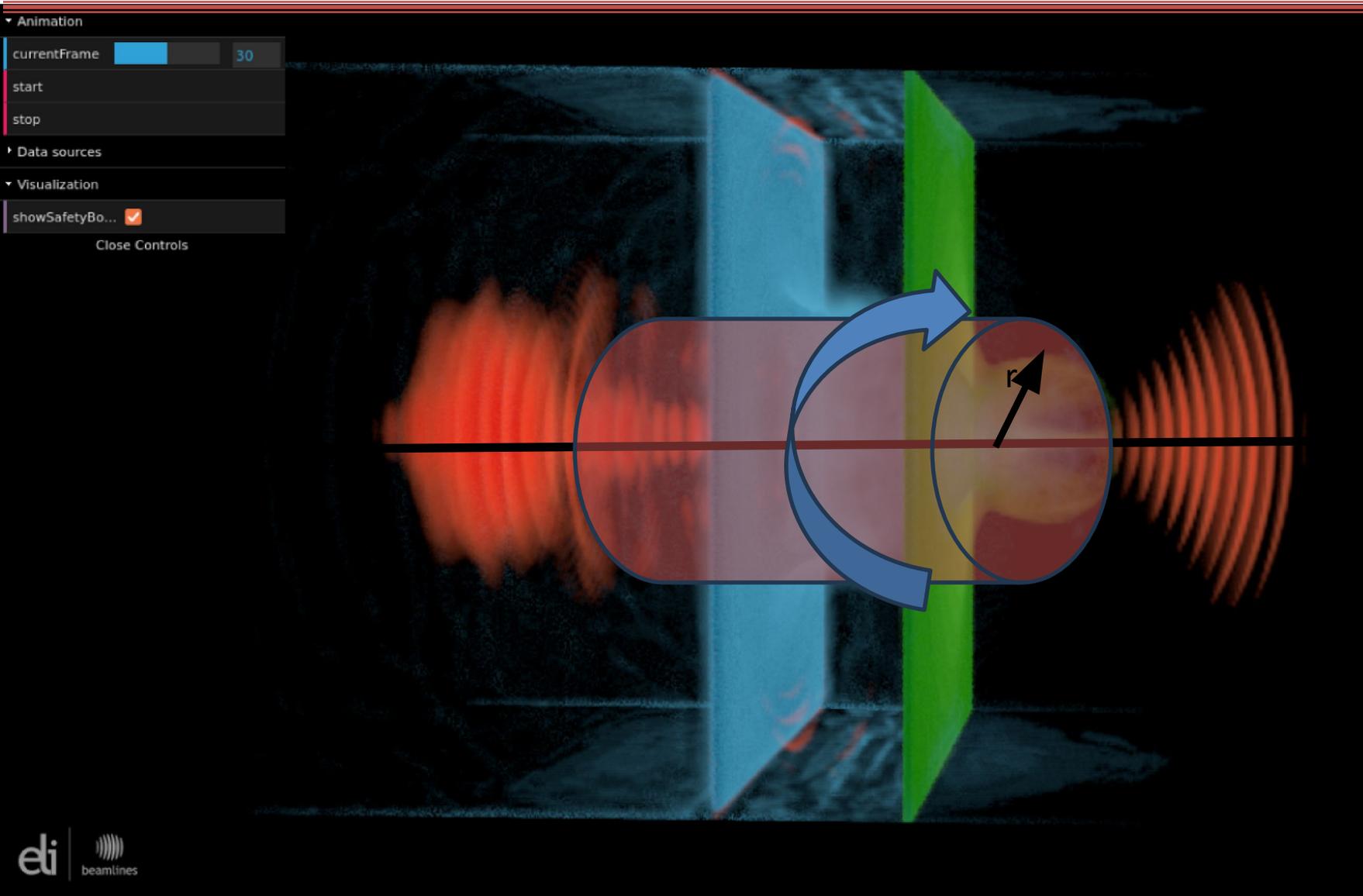
**INVARIANZA
per traslazioni**





I campi sono proiettati in una mappa a simmetria cilindrica (z,r)

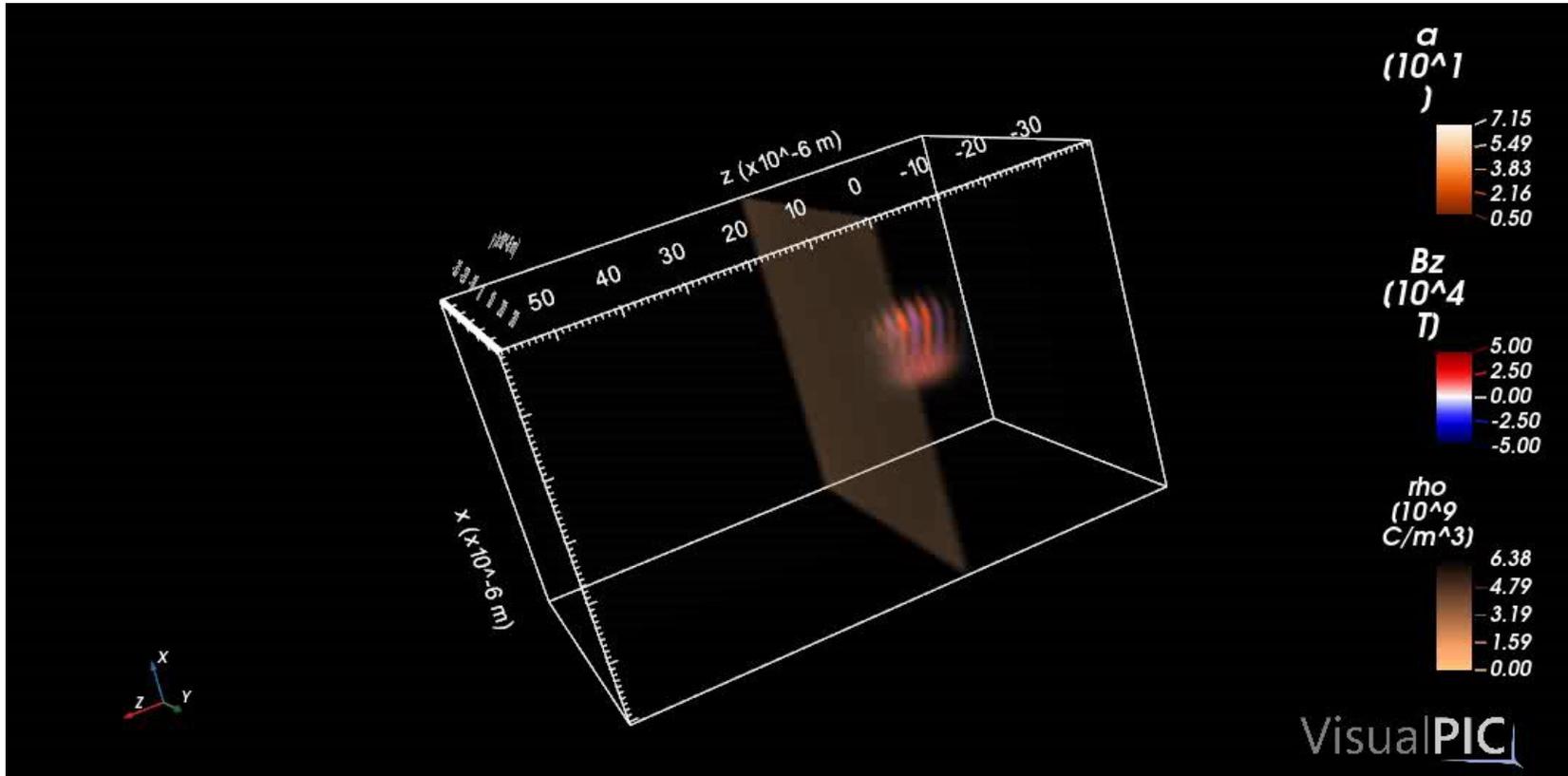
Questo funziona bene se i campi hanno simmetria cilindrica



I campi sono proiettati in una mappa (z,r) e sviluppati in modi di rotazione .

$$\sin(m \phi)$$

Maggiore e' il valore massimo di m, Maggiore e' la verosimiglianza con la geometria full-3D



Esempio: Interazione tra un impulso laser di potenza **1PW e fase elicoidale** con una targhetta di carbonio ultra sottile.

Geometria q-3D con m massimo pari a 6

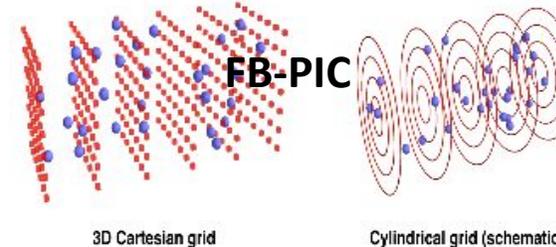
2D,q-3D,3D



CPU

Il piu' completo per I moduli aggiuntivi (radiazione, collisioni, generazione di particelle. **Semplice ma non velocissimo**)

q-3D

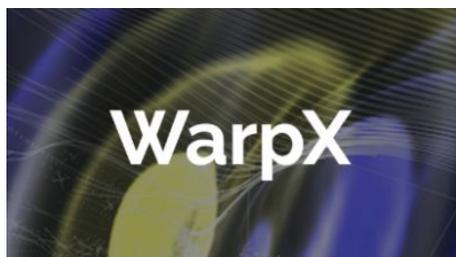


GPU

(CPU)

Super veloce e ottimizzato per LWFA/NCD. Funziona splendidamente con una o poche GPU

2D,q-3D,3D



GPU

(CPU)

Flessibile e veloce.

2D,q-3D,3D



GPU

(CPU)

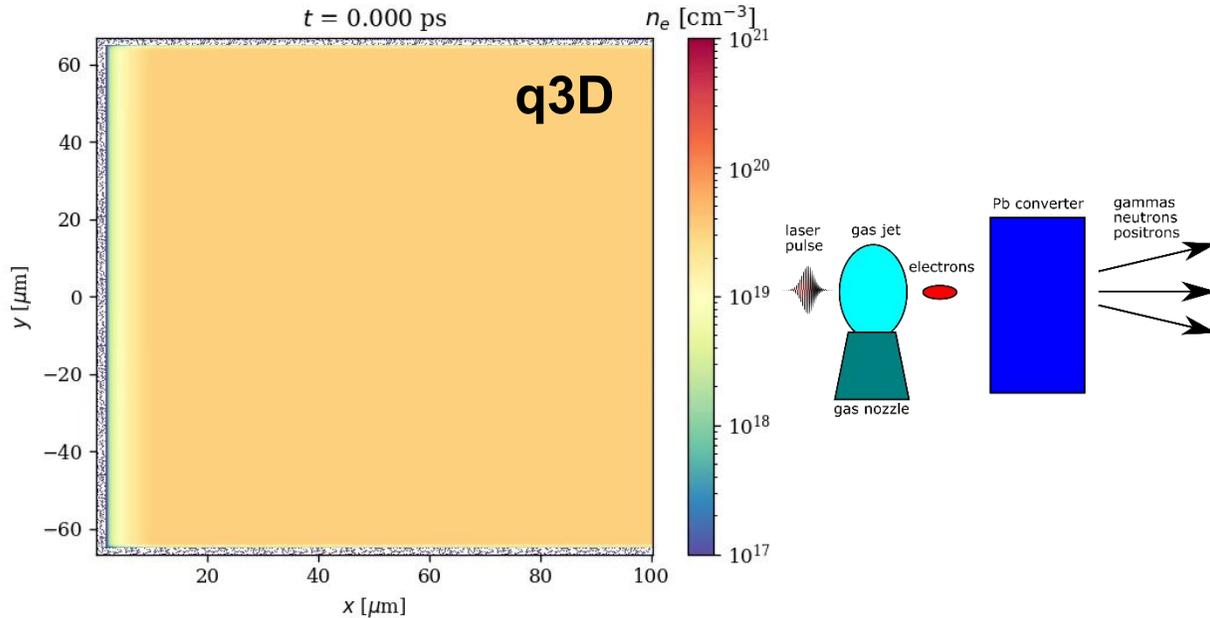
Flessibile, completo e veloce. E' piuttosto difficile da usare perche' usa delle convenzioni non usuali per le scale.

APPROFONDIMENTO

Simulazioni per LWFA e accelerazione di ioni-sorgenti gamma

LWFA (accelerazione di elettroni)

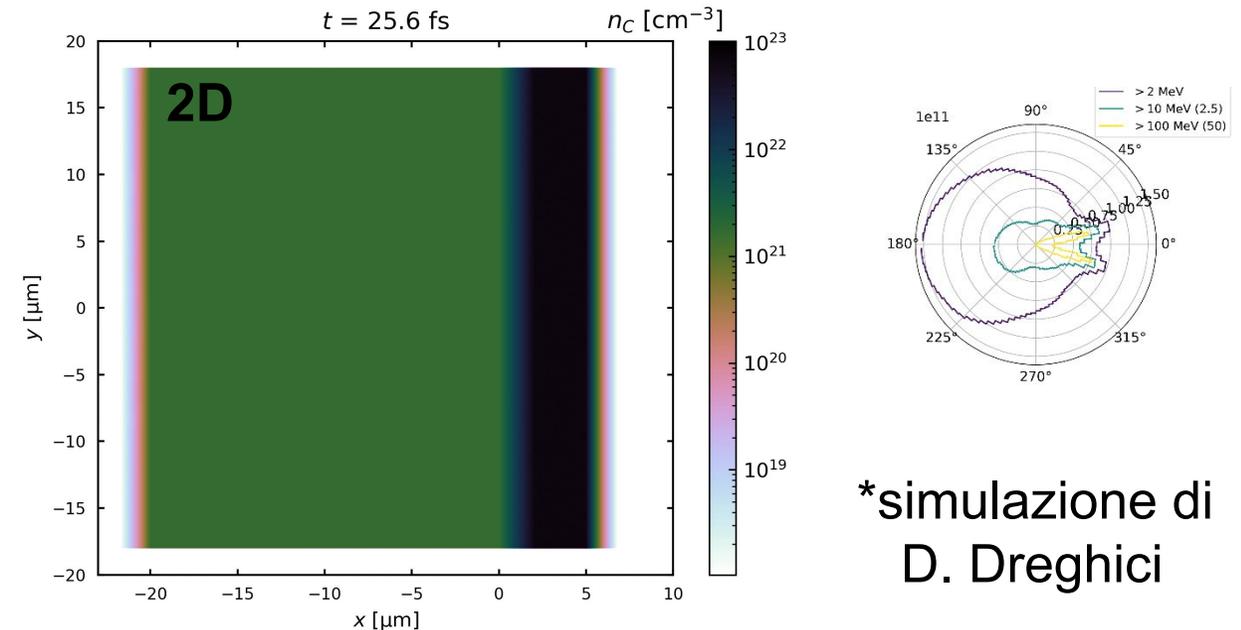
Richiede geometrie q3D/3D e una finestra mobile. Le simulazioni possono essere lunghe (in base alle dimensioni del gas-jet), **ma di solito in q3D sono fattibili senza problemi**



*simulazione di V. Horny

Accelerazione di ioni/sorgenti gamma con targhette solide sottili

Richiede geometrie 2D/q3D/3D. **Le simulazioni sono di norma molto piu' costose delle LWFA** perche' le densita' di particelle sono 10000 volte maggiori. **Le simulazioni 3D sono accessibili solo a centri con grandi capacita' di calcolo**



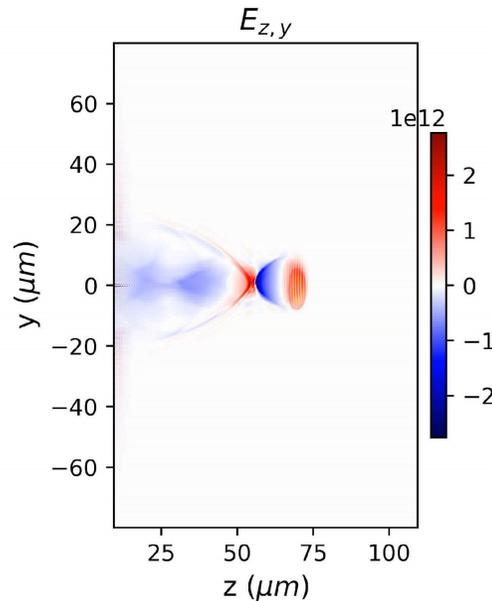
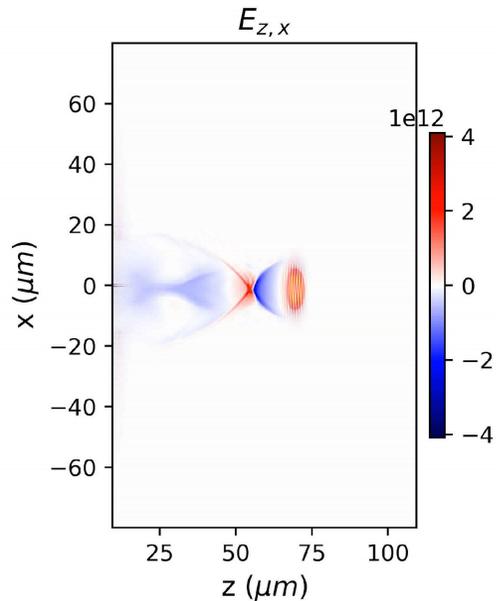
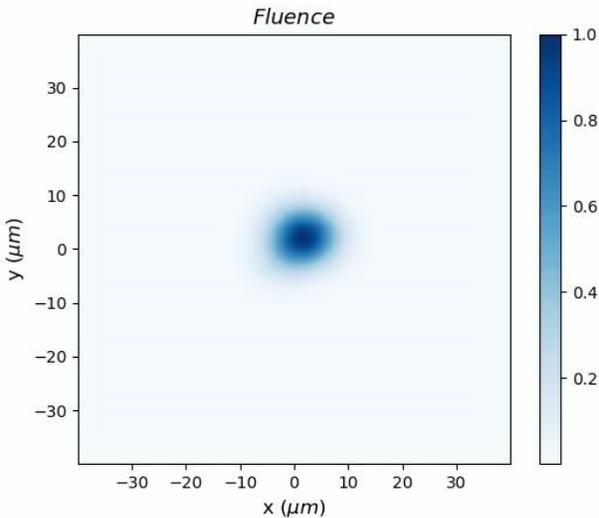
*simulazione di D. Dregheci

Virtual Lab Infrastructure VLI-LPIC package (VLI-Laser to PIC interface)

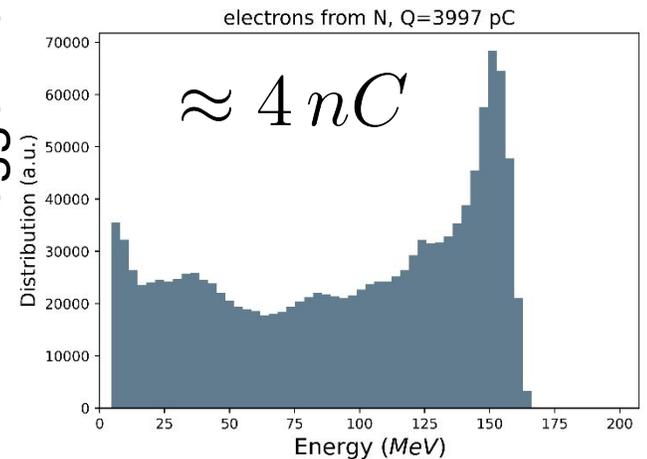
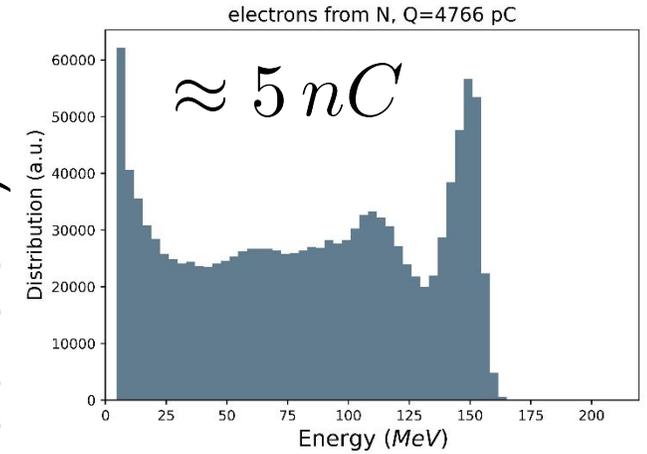
(P. Tomassini, F. Avella, L. Labate ...)

Esempio: simulazioni start-to-end con impulsi post-compressi

(11fs FWHM, 1.5J)



Variabilita' dell'impulso laser
(stessa energia, ma aberrazioni
leggermente differenti)



Simulazioni q3D
con FBPIC (m massimo = 6)

- Le tecniche di simulazione PIC sono oggi uno strumento relativamente semplice da usare, estremamente flessibile ed indispensabile per dimensionare gli esperimenti e analizzare i loro risultati.
- A ELI-NP abbiamo sia risorse di calcolo distribuite sulle normali CPU e sulle piu' veloci GPU che esperienza con codici PIC open source.

Entrambe (risorse ed esperienza) possono essere messe in comune all'interno di una collaborazione.

Grazie per la vostra attenzione!

**Posizioni aperte per Ph.D.
e post doc in
theory@LDED**



 *applied sciences*
an Open Access Journal by MDPI

IMPACT FACTOR 2.7 CITESCORE 4.5

New Trends in Laser Wake Field Acceleration and Related Secondary Particles Generation

Guest Editors
Dr. Paolo Tomassini, Dr. Vojtech Horny, Dr. Domenico Doria, Dr. Luca Labate

Deadline
30 June 2024

mdpi.com/si/188513

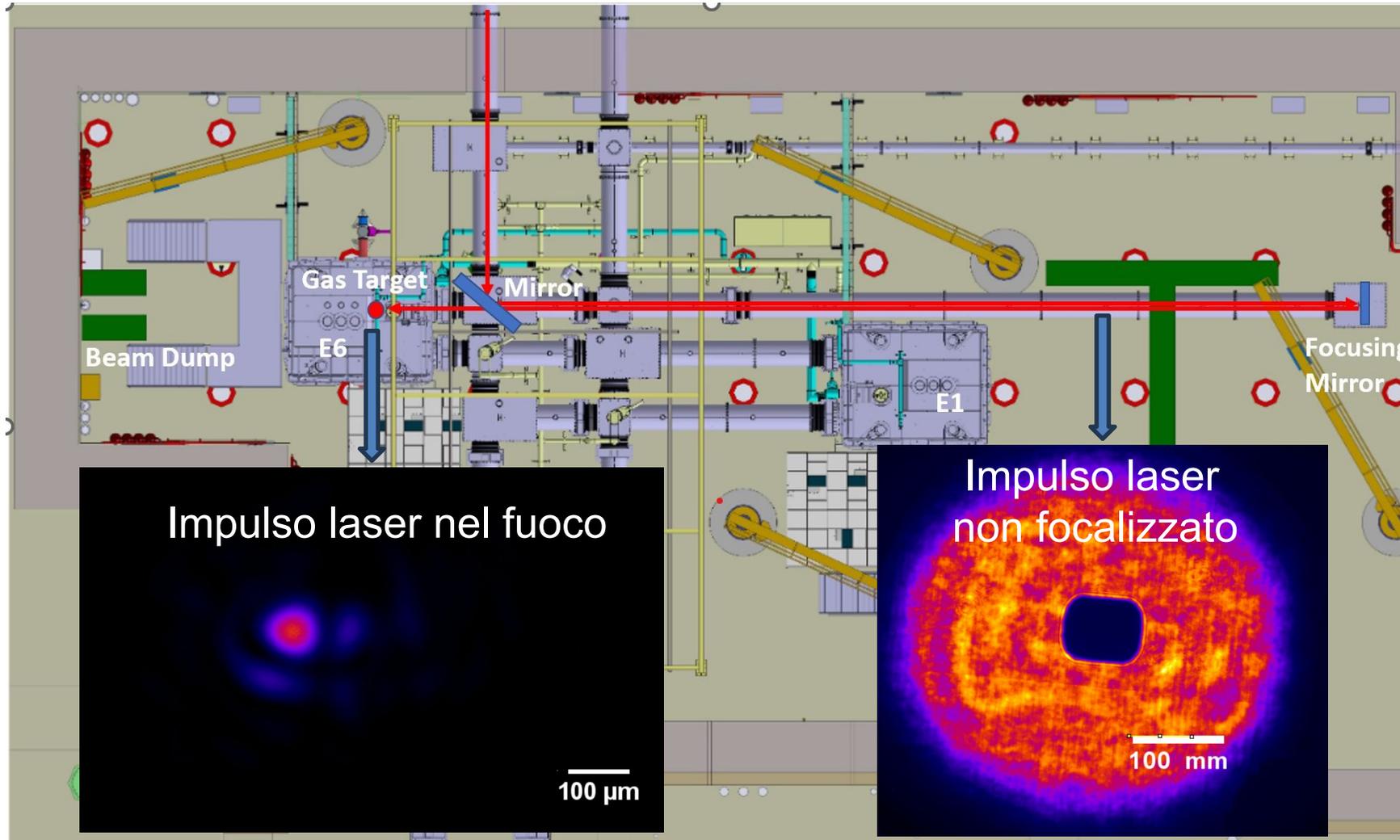
Special Issue
Invitation to submit

Perche' e' fondamentale avere delle (buone) simulazioni...

1. E' possibile predire (ovviamente con un certo grado di approssimazione) il risultato degli esperimenti che verranno svolti a I-LUCE e dimensionare i rivelatori
2. E' possibile **ottimizzare il punto di lavoro** (ad es. pressione del gas-jet, lunghezza focale della parabola, posizione del fuoco...)
3. A posteriori, e' possibile confrontare i dati sperimentali con le simulazioni ed **avere un supporto** (piu' o meno solido in base alla qualita' delle simulazioni) **per l'interpretazione dei dati.**
4. In molti casi e' possibile attivare/disattivare processi fisici nelle le simulazioni per poter **isolare facilmente quali di essi hanno un ruolo rilevante** durante gli esperimenti a I-LUCE.

e perche' e' cosi' difficile avere delle (buone) simulazioni

1. **E' molto difficile** avere informazioni sufficientemente accurate della forma (distribuzione dell'intensita') dell'impulso **laser sul fuoco**, "sparo per sparò"
2. E' difficile conoscere l'esatta **distribuzione di densita'** del bersaglio nel caso di accelerazione di elettroni (puo' essere fatta con l'interferometria nel caso LWFA), mentre e' praticamente impossibile determinare sperimentalmente la mappa di densita'/temperature del plasma **nel caso di interazione laser/solido**
3. **Anche i tool di simulazione hanno le loro limitazioni:** spesso lavorare con una geometria 2D e/o con una risoluzione non elevata sono scelte obbligate in caso di risorse di calcolo limitate.



Esempio: Impulso laser da 10PW a ELI-NP, focalizzato con una parabola (specchio parabolico) di focale molto lunga (30m) per accelerazione di elettroni

? Come simulare in modo accurato un fascio di questo tipo?

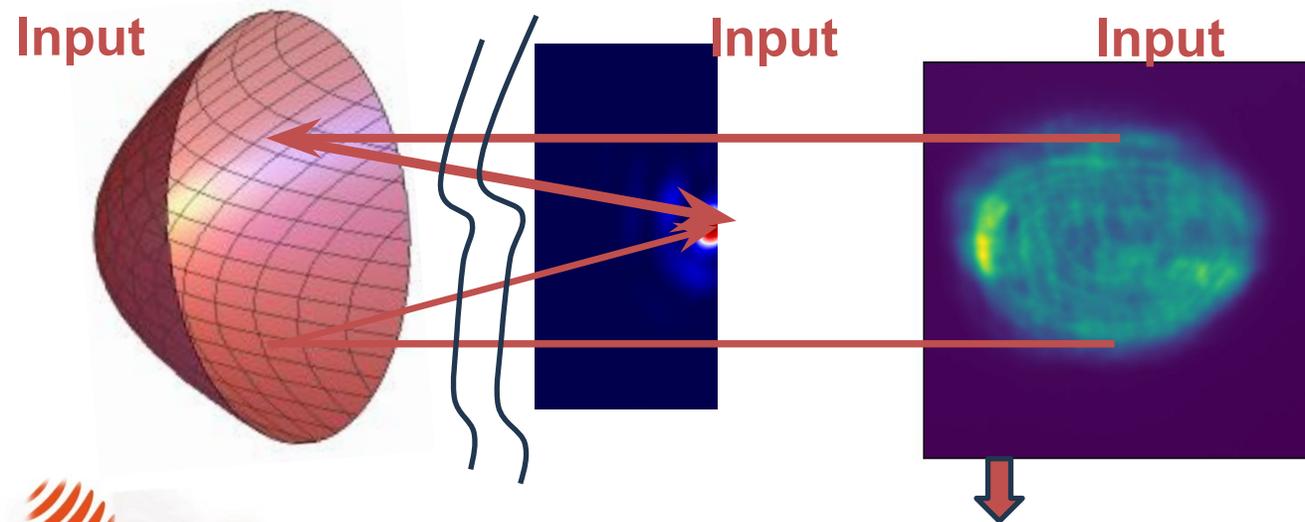
*PI P. Ghenuche

Virtual Lab Infrastructure

VLI-LPIC (VLI-Laser to PIC interface)

(P. Tomassini, F. Avella, L. Labate ...)

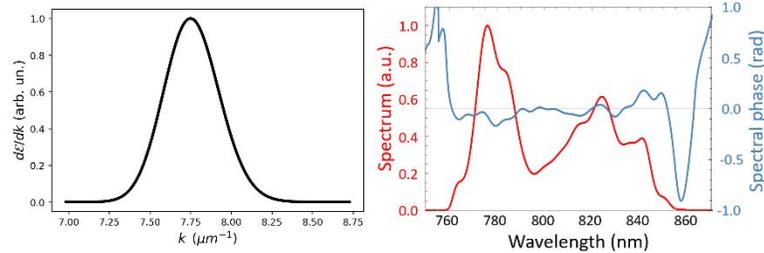
Ricostruzione 3D (inclusi i fronti di fase) dell'impulso



GOAL: Ricostruisce l'impulso in modo automatico e lo invia alla simulazione PIC

Uscita inviata direttamente al codice PIC

INPUT

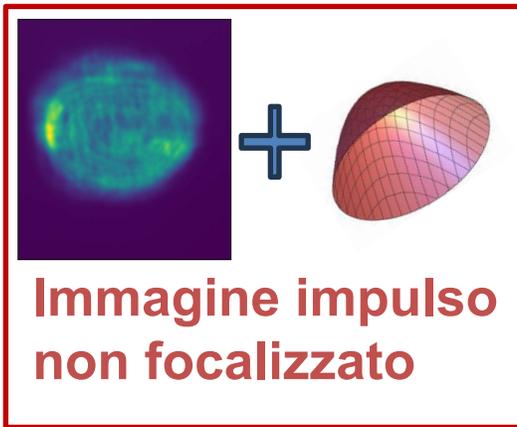


VLI-LPIC package (P. Tomassini, F. Avella, L. Labete...) (VLI-Laser to PIC interface)

Risolve l'equazione di Helmholtz

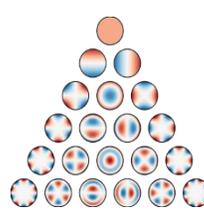
$$2ik_0 \partial_z \hat{E}(\vec{x}, k_0) = \nabla^2 \hat{E}(\vec{x}, k_0)$$

TO PIC (OUTPUT)



Aggiunge le aberrazioni

$Z=[z_1, \dots, z_{28}]$
List of Zernike Polynomial coefficients



Ottimizzazione
Algoritmo genetico + pivot, preceduto da un campionamento casuale dello spazio a 28 dimensioni

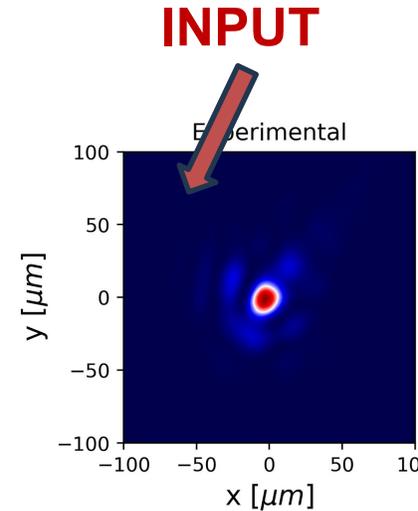
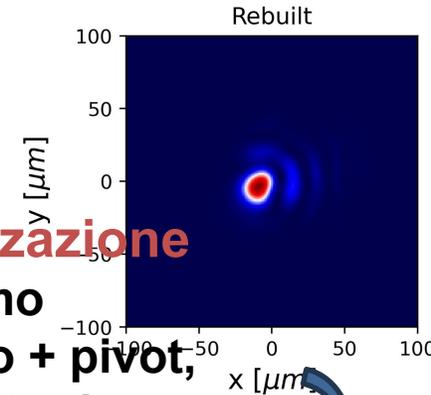


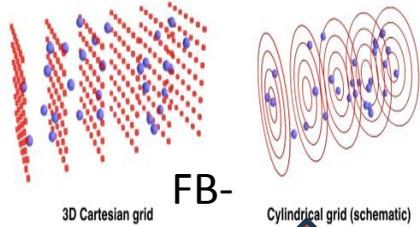
Immagine impulso focalizzato

P. Tomassini, F. Avella et al., "Automatic reconstruction of the laser transverse intensity and phase structures near the focal plane for advanced Particle In Cell modelling", to be submitted on **J. Comp. Physics**

Virtual Lab Infrastructure VLI-LPIC package (VLI-Laser to PIC interface)

+ EPOCH, SMILEI (in aggiornamento)

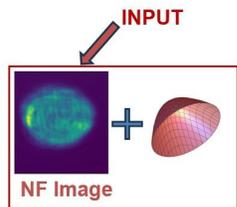
DISPONIBILE



DISPONIBILE



**Impulso ricostruito
in 3D e inviato
direttamente al
codice PIC**



Solve the Helmoltz equation for the propagation

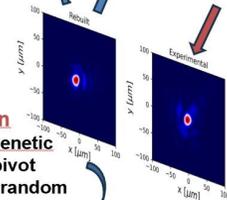
$$2ik_0 \partial_z \hat{E}(x, y, z) = \nabla_{\perp}^2 \hat{E}(x, y, z)$$

Add aberrations

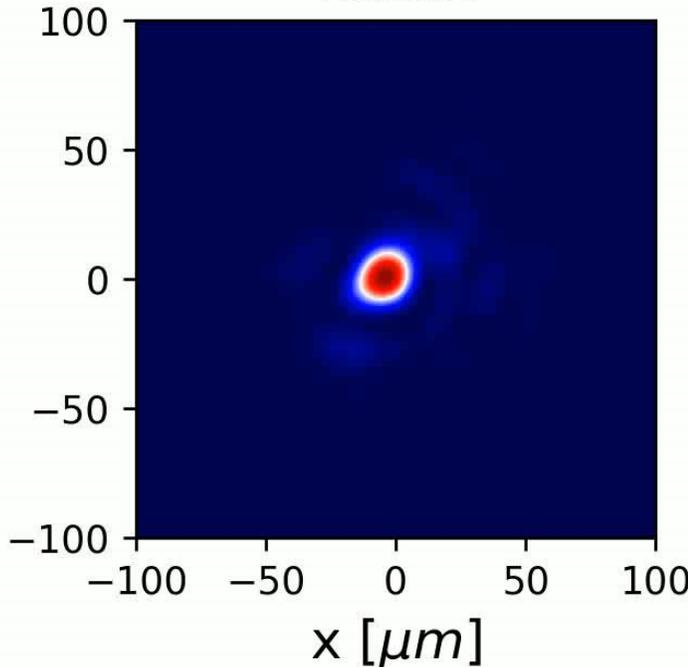
$Z = [z_1, \dots, z_{28}]$
List of Zernike
Polynomial
coefficients

Optimization
Currently a genetic
algorithm + pivot
preceded by random
sampling of the 28th
dimensional space

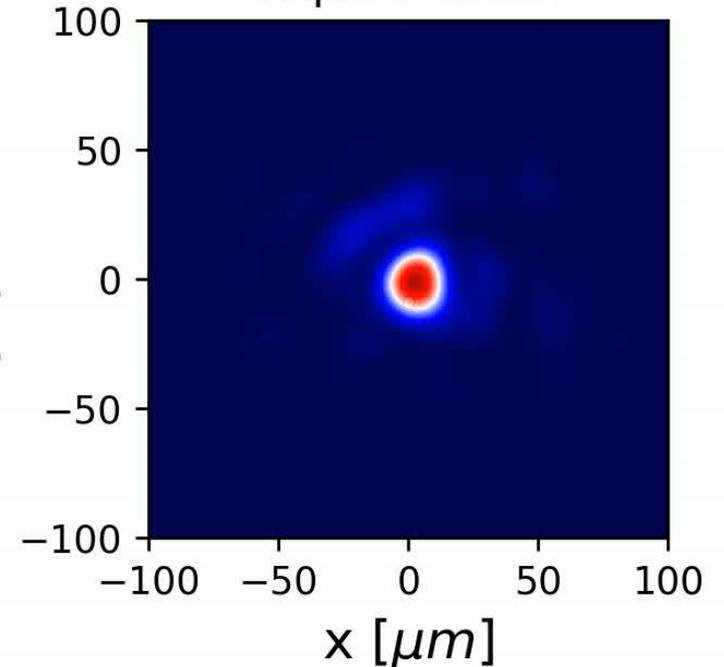
TO PIC
(OUTPUT)



y [μm]



y [μm]



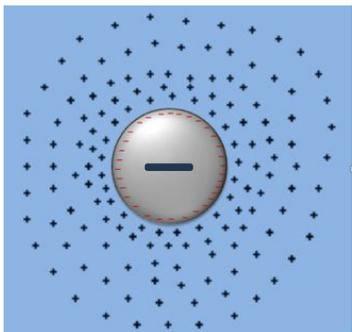
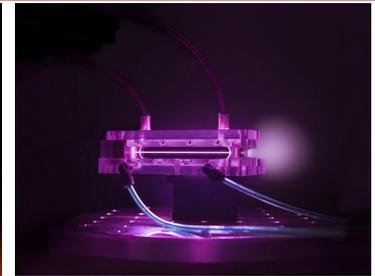
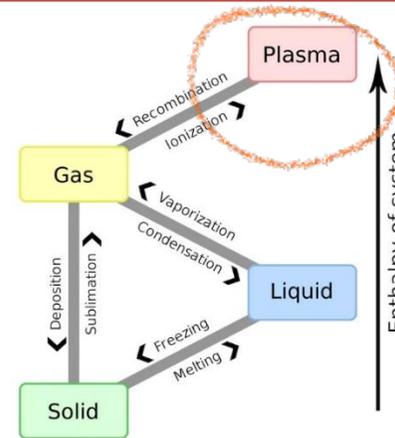
Cosa possiamo simulare con un codice PIC? Particle-In-Cell (Particelle In Celle)

Definizione (rigorosa) dello stato di plasma:

Il plasma e' un gas ionizzato ...

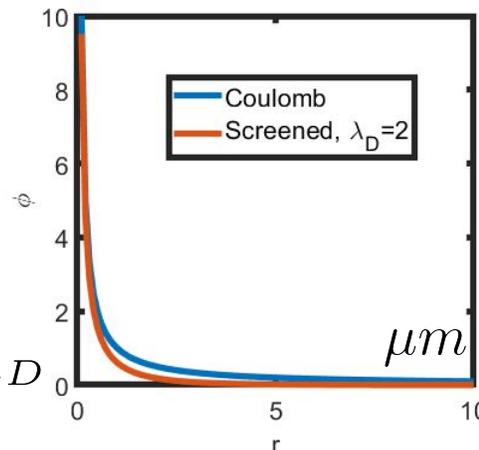
globalmente neutro...

*che mostra **effetti collettivi** (?)*



$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T}{e^2 n_0}}$$

$$\phi = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} e^{-r/\lambda_D}$$



Senza entrare nei dettagli: in un plasma sufficientemente denso e non troppo caldo (come quelli che simuleremo) le cariche libere sono cosi' tante che **le interazioni binarie (carica-carica) sono molto piu' piccole di quelle collettive efficaci (carica-tutte le altre cariche)**