ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE

Fakulta jaderná a fyzikální inženýrská

Katedra fyziky

VÝZKUMNÝ ÚKOL

PIC simulace interakce intenzivního laserového impulsu s plynným terčem v kódu EPOCH.

Autor: Ekaterina Eremenko
Vedoucí: Ing. Michal Nevrkla, Ph.D
Akademický rok: 2018/2019

Poděkování

Chtěla bych poděkovat Ing. Michalovi Nevrklovi Ph.D. za jeho pomoc s vypracováním výzkumného úkolu a pochopením tématu a také Ing. Martině Žákové za pomoc s práci v programu EPOCH.

Ekaterina Eremenko

Název práce: **PIC simulace interakce intenzivního laserového impulsu s plynným terčem v kódu EPOCH.**

Autor: Ekaterina Eremenko

Obor: Experimentální jaderná a částicová fyzika

Druh práce: Výzkumný úkol

Vedoucí práce: Ing. Michal Nevrkla, Ph.D. Katedra fyzikální elektroniky, Fakulta jaderná a fyzikální inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

Konzultant: Ing. Martina Žáková. Katedra fyzikální elektroniky,Fakulta jaderná a fyzikální inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

Abstrakt: Cílem práce je simulace interakce ultrakrátkého intenzivního laserového pulsu s plasmatem pomocí Particle-In-Cell metody v programu EPOCH. Mechanismus buzení plazmové vlny laserem je rozebrán, je uveden princip fungování PIC a je představen stručný popis programu EPOCH. Simulovaná fyzikální úloha je definována a realizována a následně zpracována pomocí programu Matlab.

Klíčová slova: LWFA, PIC simulace, intenzivní laser, laserové plasma, EPOCH code

Title: **Intense laser interaction with gas target PIC simulation using EPOCH code.**

Author: Ekaterina Eremenko

Abstract: The purpose of this work was to simulate interaction of ultra-high intensity laser pulse with plasma using Particle-In-Cell method. EPOCH open-source code was used. The mechanism of laser plasma wave excitation was presented. PIC method was discussed, EPOCH code was introduced and input parameters were listed. The simulated task was defined, implemented and processed using the Matlab program.

Key words: LWFA, PIC simulation, intense laser, laser plasma, EPOCH code

Obsah

Úvod

Urychlené svazky částic jsou široce používány v průmyslu, medicině a také v různých typech výzkumu, včetně fyziky vysokých energií. Existuje rozsáhlý počet metod jak získat stabilní svazek částic.

V případě elektronů se hojně využívají lineární urychlovače. Avšak tento způsob má limitovanou největší hodnotu elektrického pole, která může být dosažena. Tato skutečnost vede k tomu, že pro možnost získáni větších energií svazku, musí být postaveny stále větší urychlovače, což vede k vysoké finanční náročnosti stavby a zprovozňování takovéhoto zařízeni.

Metoda urychlování částic pomocí ultrakrátkých intenzivních laserových pulsů, oproti lineárním urychlovačům, umožňuje přidání svazku částic vysoké energie na krátké milimetrové vzdálenosti. Pro urychlování elektronů se používá interakce ultrakrátkých intenzivních laserových pulsů s plynovým terčem, při které se vytváří plasma a budí se plasmová vlna. Na začátku této práce je uveden stručný popis mechanizmu buzení plasmových vln laserem.

Interakce intenzivního laserového pulsu s plazmatem je složitý proces, a bylo by užitečné předpovědět jeho chování v určitých podmínkách. Jeden ze způsobů jak to může být uskutečněno je počítačová simulace. Hlavním cílem této práce je simulace interakce laserového pulsu s plazmatem.

Pro správný výsledek simulace je důležité vědět, jak sestavit simulační úlohu a jaký je očekávaný výsledek. Proto je důležité chápaní simulovaného systému a interakcí probíhajících uvnitř tohoto systému. V první kapitole této práce jsou popsány relevantní pojmy laserové fyziky a fyziky plazmatu a jsou rozebrány základy interakce laserového svazku a plazmového prostředí.

Simulace byla provedena pomocí Particle-In-Cell (PIC) metody v programu EPOCH. Teoretický popis metody a použitého kódu jsou představené v druhé kapitole práce.

V třetí kapitole jsou popsány parametry simulace a vysvětlena volba každého z nich pro případ dopadu laserového pulsu na vodíkový terč. Ve čtvrté kapitole je rozebrán způsob zpracování výstupu a také samotné výsledky simulace.

Na konci práce je znázorněn vstupní soubor pro kód EPOCH použitý pro simulovaní úlohy.

Kapitola 1

1 Buzení vln v plazmatu laserem

Pro popis interakci plazmatu a laseru je potřeba znát základy popisu laserového pulsu a také fyziku plasmatu. Na začátku této kapitoly budou uvedeny základní pojmy fyziky plasmatu a popisu laserového svazku, dále jsou uvedeny děje probíhající při propagaci laserového svazku plazmatem.

1.1 Laserový puls

Laserový puls je elektromagnetická vlna, která se šíří prostředím. Elektromagnetická vlna může být popsána pomocí intenzity elektrického pole $\vec{E}$ v jistém bodě prostoru $\vec{r}$ [1]

$$\vec{E} = \vec{i_e} E_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} + \Phi), \tag{1}$$

kde $\vec{i_e}$ je vektor polarizace, E_0 amplituda, ω frekvence, $\vec{k}$ vlnový vektor a Φ je fázová konstanta.

Intenzitu pulzu I je veličina vyjádřena pomocí vztahu (pro vakuum)

$$I = \frac{1}{2} \epsilon_0 \, \mathrm{c} \, E_0^2, \tag{2}$$

kde ϵ_0 je permitivita vakua a c je rychlost světla.

Pro popis elektromagnetické vlny se také používají skalární potenciál φ a vektorový potenciál $\vec{A}$, které se zavádějí pomocí vztahů pro elektrické pole $\vec{E}$

$$\vec{E} = -\nabla \varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \tag{3}$$

a magnetické pole $\vec{B}$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}. \tag{4}$$

1.1.1 Gaussovský puls

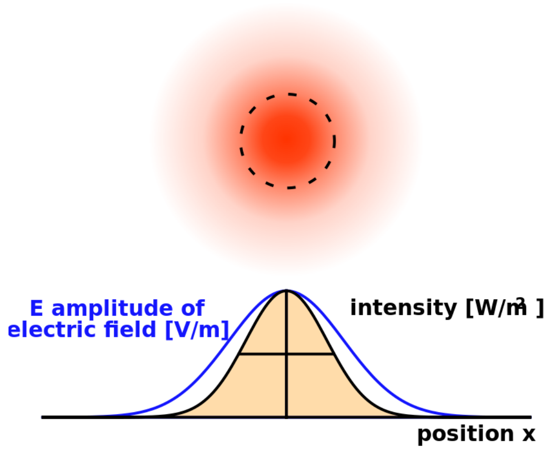
Gaussovský puls je puls, jehož profil amplitudy elektrického pole $\vec{E}(r,z)$ je dán Gaussovou funkci

$$\vec{E}(r,z) = E_0 \frac{\omega_{bwr}}{\omega_G(z)} e^{-\frac{r^2}{\omega_G(z)^2}} e^{-i(kz + k\frac{r^2}{2R(z)})} e^{i\varphi}, \tag{5}$$

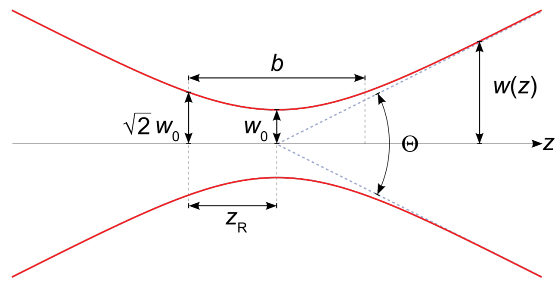
kde $\omega_G(z) = \omega_{bwr}\sqrt{1 + (z/z_R)^2}$ je poloměr gaussovského svazku, ω_{bwr} hodnota nejmenšího poloměru svazku (beam waist radius), $R(z) = z(1 + (z_R/z)^2)$ poloměr vlnoplochy a $z_R = \pi\omega_{bwr}^2\lambda$ je Rayleighova vzdálenost, $\varphi = \arctan(z/z_R)$ je fáze a k je vlnové číslo. Intenzita $I(r,z)$ tohoto pulsu je taky gaussovská

$$I(r,z) = I_0 (\frac{\omega_{bwr}}{\omega_G(z)})^2 e^{-\frac{2r^2}{\omega_G(z)^2}}, \tag{6}$$

kde I_0 je vrcholová intenzita. Na Obr. 1 je schematické znázornění Gaussovského svazku.



(a) Nahoře: profil svazku v ohniskové rovině. Dole: schematické křivky závislosti E a I na poloze.

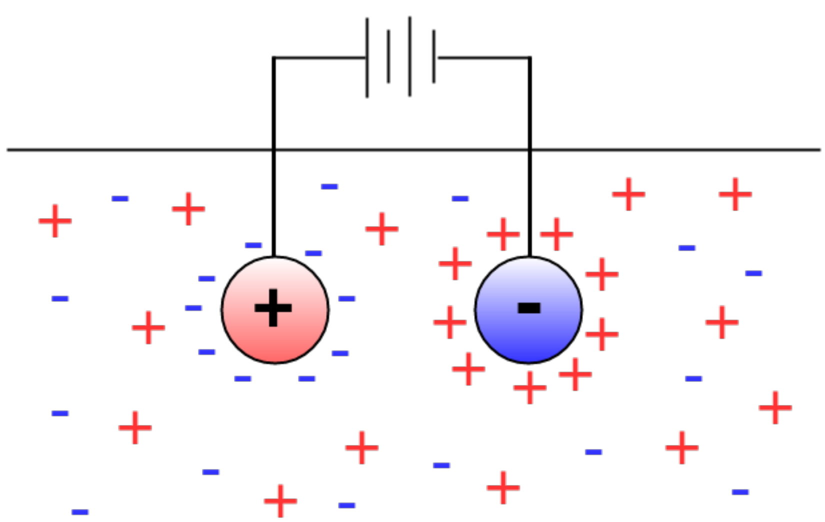


(b) Závislost $\omega_G(z)$ na vzdálenosti z podél svazku.

Obr. 1: Gaussovský svazek. Převzato z [2].

1.2 Plazma

Plazma je kvazineutrální soubor ionizovaných a neutrálních částic, který vykazuje kolektivní chování [3] - jako celek reaguje a vytváří elektromagnetická pole. Plazma vzniká ionizaci např. plynu.



Obr. 2: Stínění náboje v plazmatu.

Kvazineutralita plazmatu znamená, že na makroskopické vzdálenosti množství kladných a záporných nábojů je stejné a plazma je neutrální. Z této vlastnosti plazmatu plyne

Debyeove stínění, jakýkoliv vloženy do plazmatu náboj je odstíněn (Obr. 2). Pojem Debyeova délka λ_D udává vzdálenost efektu stínění, po které plazma opět prokazuje kvazineutralitu.

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T}{n_e e^2}}, \tag{7}$$

kde n_e je hustota elektronů, k_B Boltzmannova konstanta a T ke teplota.

Plazmová frekvence je dána vztahem

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0}}. \tag{8}$$

Délka plazmové vlny potom je

$$\lambda_p = \frac{2\pi\,\mathrm{c}}{\omega_p}. \tag{9}$$

Pro šíření elektromagnetické vlny plazmatem platí disperzní vztah

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \mathrm{c}^2\, k^2. \tag{10}$$

V případě $\omega > \omega_p$, elektromagnetická vlna propaguje plazmatem, v opačném případě $\omega < \omega_p$ vlna je odražená plazmatem. Pro $\omega = \omega_p$ je definována kritická hustota n_c, která je dána vztahem

$$n_c[10^{21}\mathrm{cm}^{-3}] = \frac{\omega^2 m_e \epsilon_0}{e^2} = \frac{1.12}{\lambda_L^2[\mu\mathrm{m}]}, \tag{11}$$

kde λ_L je délka vlny laseru. Pro $n_e < n_c$ hustota plazmatu je podkritická a pro $n_e > n_c$ je nadkritická.

Prostorový index lomu $\eta(r)$ elektromagnetické vlny v podkritickém plazmatu je dán vztahem

$$\eta(r) = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2(r)}{\omega^2}} = \sqrt{1 - \frac{n_e}{n_c}}. \tag{12}$$

1.3 Buzení vln

1.3.1 Pohyb elektronů v poli laseru

Pohyb elektronu hybnosti $\vec{p}$ v polích laseru $\vec{E}$ a $\vec{B}$ je určen pomocí Lorentzovy síly

$$\frac{\mathrm{d}\,\vec{p}}{\mathrm{d}\,t} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}). \tag{13}$$

Normalizovaný vektorový potenciál a_0 je bezrozměrná veličina, která udává informaci o tom, jestli působení elektromagnetického pole vyvolává relativistický pohyb a je dána vztahem

$$a_0 = \frac{eE_0}{m_e\,\mathrm{c}\,\omega} = \frac{e \mid \vec{A} \mid}{m_e\,\mathrm{c}} \approx 0.855\lambda[\mu\mathrm{m}]\sqrt{I[10^{18}\mathrm{W/cm}^2]}, \tag{14}$$

kde e je náboj elektronu a m_e je hmotnost elektronu. Je-li $a_0 << 1$ můžeme zanedbat vliv magnetického členu (13) a pohyb je nerelativistický, při $a_0 > 1$ elektrony v plazmatu, přivedené do pohybu elektromagnetickým polem, oscilují relativisticky.

Když aproximujeme pole laseru rovinnou elektromagnetickou vlnou propagující podél osy z a polarizovanou ve směru osy x - $\vec{E}(z) = \vec{e}_x E_0 \cos(k_0 z - \omega_0 t)$, pro ilustraci principu interakce elektronů a laseru dá se odvodit rovnice pro normalizovanou rychlost jednoho elektronu $\beta = v/\,\mathrm{c}$ v tomto poli [4]. Za předpokladu nerelativistického pohybu $\beta << 1$, druhý člen Lorentzovy síly může být vynechán a rychlost elektronu je dána vztahem

$$\beta = -a_0 \sin(\omega_0 t). \tag{15}$$

Elektron v klidu po interakci s polem laseru začne oscilovat, přitom nezískává žádnou energii.

Pro relativistický případ ($a_0 > 1$) elektron osciluje dvakrát laserovou frekvenci podél z, ale při výpočtech člen $\vec{v} \times \vec{B}$ už nemůže být vynechán, a ve výsledku tlačí elektron dopředu ve směru osy z. Takže elektron osciluje a pohybuje se dopředu, ale stejně jako v předchozím případě nezískává během tohoto pohybu energii, důvodem čehož je předpoklad rovnoměrné nekonečné rovinné vlny.

Aproximace rovinnou vlnou je dobrý nastroj pro pochopení vzniku základních pohybů elektronů a nutností podmínky relativistického režimu pro pohyb částic podél směru propagací laseru. V reálných experimentech se používají laserové Gaussovské pulzy, což vede k dalším složitějším dějům v plazmatu, např. vznik ponderomotorické síly a excitace plazmové vlny.

1.3.2 Ponderomotorická síla

Ponderomotorická síla udává tlak radiace vyvolány intenzitou laserového pulsu a je dána vztahem

$$\vec{F}_p = -\frac{e^2}{4m\omega^2}\nabla(E^2) = -m_e\,\mathrm{c}^2\,\nabla(a_0^2/2). \tag{16}$$

$\vec{F}_p$ rovnoměrně ve všech směrech vytlačuje částice z ohniska pulsu, přičemž působí stejnou sílou jak na kladné, tak i na záporné částice.

Důležitou vlastnosti ponderomotorické síly je nepřímo úměrná závislost na hmotnosti částice $F_p \propto 1/m$, důsledkem které lehké elektrony jsou vytlačovány z cesty laserového pulsu značně větší sílou než těžší iony. Tato skutečnost dovoluje považovat kladné iony v daném systému za nepohybné.

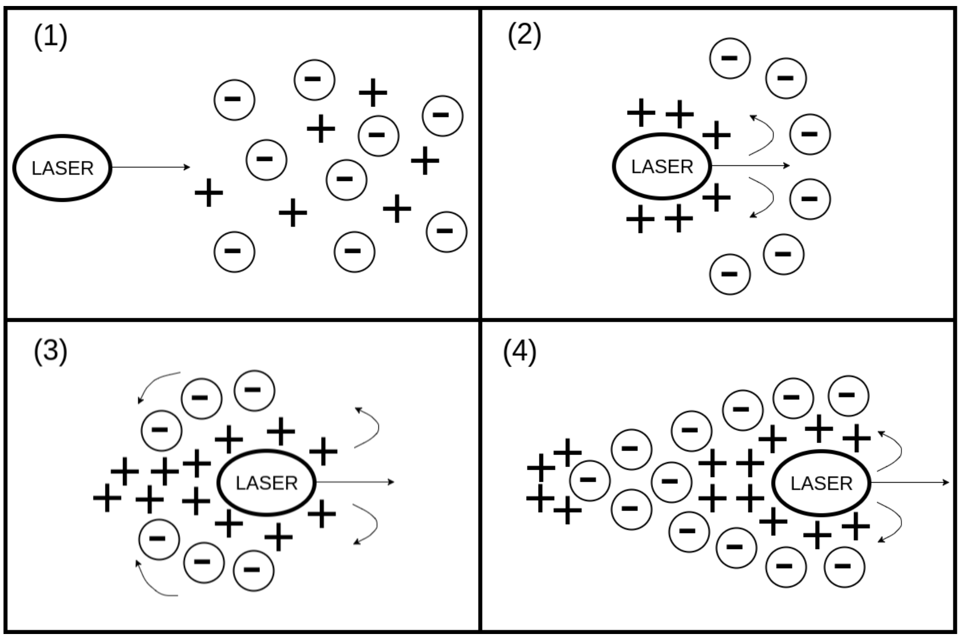
Při šíření laserového svazku plazmatem, kvůli přítomnosti ponderomotorické síly, probíhá excitace plazmové vlny, která může být dvou typů v závislosti na hodnotě bezrozměrného vektorového potenciálu a_0, pro $a_0 << 1$ excitovaná plazmová vlna je lineární, $a_0 > 1$ dochází k tvorbě nelineární vlny.

1.3.3 Lineární vlna

Při interakci laserového pulsu s plazmatem vlivem ponderomotorické sily se elektrony nacházející podél trajektorii pohybu pulsu jsou vytlačovány dopředu, přičemž kladně nabité iony zůstávají nehybné. Tato skutečnost vede k separaci nábojů a vytváření elektrického pole v plazmatu, které působí na elektrony ve směru opačném působení $\vec{F}_p$. Změnu hustoty elektronů popisuje veličina Δn_e a její velikost závisí hlavně na gradientu intenzity pulsu. Vzniklé posunem elektronů elektrické pole vrací každý elektron nazpět do rovnovážní polohy, ale kvůli získané tímto pohybem energii, elektron přeletí svojí původní polohu, tímto procesem jsou způsobeny oscilace elektronů kolem svojí rovnovážné polohy. Laserový puls se neustálé pohybuje dopředu a předbíhá elektrony, kvůli čemuž se mění směr působení ponderomotorické síly na této částice, v důsledku elektrony jsou vytlačeny ve směru opačném šíření pulsu.

Oscilace elektronů jsou vyvolány podél celé dráhy laserového pulsu a tvoří se plazmová vlna v brázdovém poli laseru, přičemž fázová rychlost plazmové vlny se rovná grupové rychlosti pulsu.

Na Obr. 3 je schematické znázornění působení ponderomotorické síly na plazma a vytváření plazmové vlny.



Obr. 3: Působení ponderomotorické síly (1,2) a vytváření plazmové vlny (3,4).

1.3.4 Nelineární vlna

V případě silné excitace, změna hustoty elektronů může vzrůst na velké hodnoty ($\Delta n_e \sim n_e$), v tomto případě ze separace nábojů vznikají velká elektrická pole a relativistické podélné rychlosti oscilací elektronů. Při oscilaci plazmatu se mění plazmová frekvence a vybuzená vlna již není lineární. Na Obr. 4 jsou znázorněny změna elektronové hustoty $\Delta n_e / n_0$ a podélné elektrické pole pro lineární a nelineární pulsy.

Podélné elektrické pole excitované plazmové vlny je dáno vztahem [6]

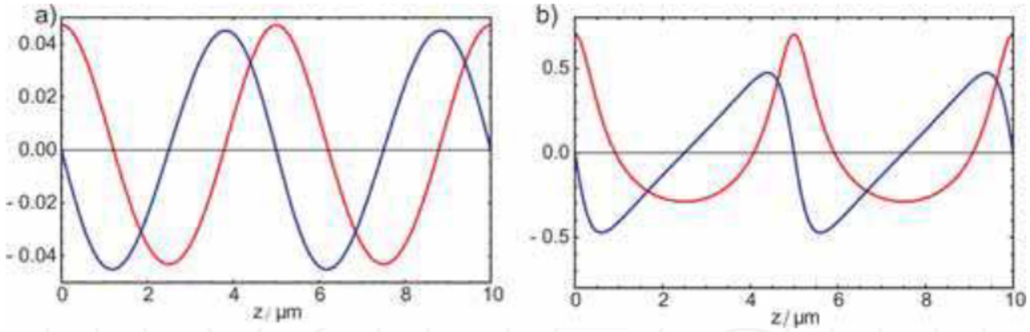
$$E_{wake} \approx \frac{a_0^2/2}{\sqrt{1 + a_0^2/2}} \, \mathrm{c} \, m_e \omega_p / e_0, \tag{17}$$

kde a_0 je normalizovaný vektorový potenciál.

Je užitečné také definovat tzv. nerelativistické wavebreaking pole pomocí vztahu

$$E_p = \frac{\mathrm{c} \, m_e \omega_p}{e_0} \simeq 96 \sqrt{n_e [cm^{-3}]}, \tag{18}$$

táto veličina udává maximální hodnotu elektrického pole ve vzniklé elektronové plazmové vlně, které může udržet ionizované plazma s plazmovou frekvenci ω_p.



Obr. 4: Změna elektronové hustoty $\Delta n_e/n_0$ (červená) a podélné elektrické pole E_x/E_p pro (a) slabě relativistický puls ($a_0 \sim 0.3$) a (b) relativisticky intenzivní puls ($a_0 \sim 1$). Převzato z [6].

1.3.5 Překlopení vlny

K překlopení plazmové vlny dochází, když rychlosti jednotlivých elektronů uvnitř vlny dosáhnou fázovou rychlost vlny. Pro plazmové vlny, jež mají malou amplitudu, elektrony kmitají zepředu dozadu, ale v případě vlny s velkou amplitudou, elektrony můžou uniknout z vlny.

Překlopení vlny určuje maximální možnou dosažitelnou amplitudu plazmové vlny a elektrická pole uvnitř této vlny. Veličina, určující od jakých hodnot elektrického pole E_{wake} se nelineární plasmová vlna překlopí, se nazývá wave-breaking limit a je dána vztahem [6]

$$E_{wb} = \sqrt{2(\gamma_p - 1)}E_p, \tag{19}$$

kde $\gamma_p \simeq \omega_{laser}/\omega_p = \sqrt{n_c/n_e}$ je relativistický faktor.

K překlopení vlny dochází pouze v případě, že amplituda laserového pulsu výrazně překročí relativistickou limitu, tzn. $a_0^2 >> 1$.

Překlopení vlny se používá pro vstřikování elektronů a jejich urychlování v brázdovém poli laseru. Uniklé z plazmové vlny elektrony můžou bud̆ vstoupit do následující periody vlny nebo také padnout dopředu do první po laserovému pulsu periody vlny, v tomto případě při pohybující se vpřed vlně elektrony budou cítit stálé zrychlování a budou uchycené vlnou. Tomuto ději se říká self-trapping elektronů.

Kapitola 2

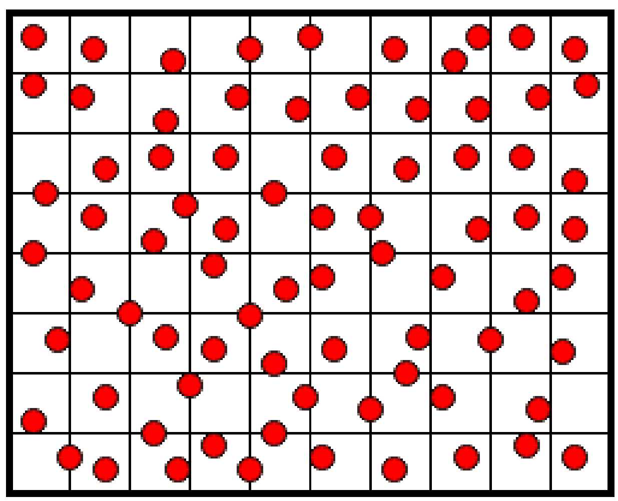
2 PIC simulace

Interakci laserového pulsu s plazmatem se nedá popisovat analytický, proto existují rozlišné numerické metody pro popis tohoto děje. Jedná z takových metod je Particle-in-Cell (dále PIC).

PIC je metoda řešení Maxwellových rovnic pro soubor částic, která je hojně používána pro předpověď chování plazmatu, včetně interakce laserového pulsu s plazmatem a popis vln v plazmatu.

2.1 Výpočetní cyklus PIC

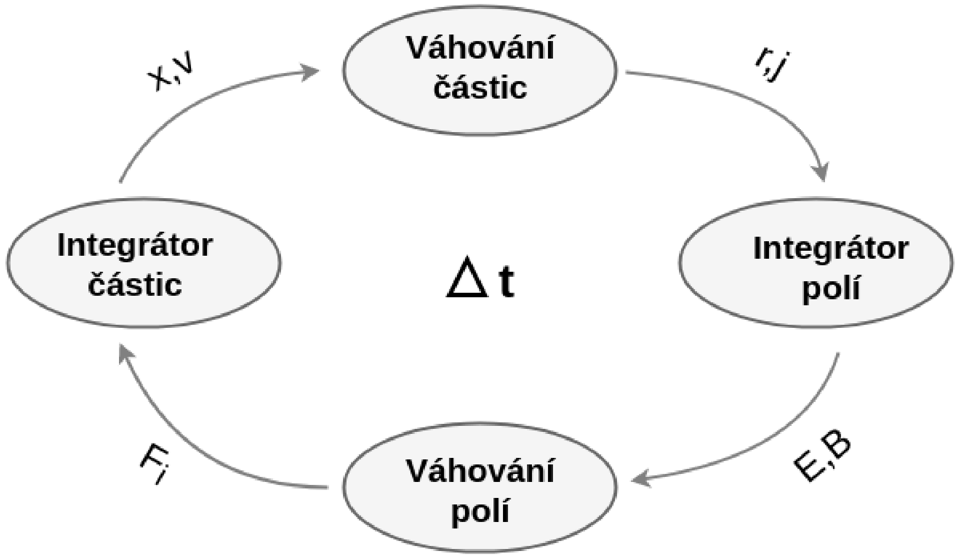
Výpočetní oblast PIC simulace je rozdělená na malé buňky, ve kterých může ležet 1 a vice částic (Obr. 5). Částice se pohybují volně dle pohybových zákonů, ale rovnice pro elektrické a magnetické pole se počítají pouze ve vrcholech získány mřížky, tj. místo vypočtu interakce částice s každou další částicí, vypočítává se interakce částice s polem generovaným těmito částicemi. Tímto způsobem výpočetní náročnost algoritmu pro systém N částic se snižuje z hodnoty N^2 na hodnotu v rozmezí $N \log N$ až N.



Obr. 5: Rozdělení výpočetní oblasti na buňky.

Cyklus PIC simulace můžeme popsat pomoci čtyř základních kroků (6), které se opakují po každém časovém kroku Δt (hodnoty s indexem i udávají informaci o částici, s j o vrcholu mřížky) [7] [9]

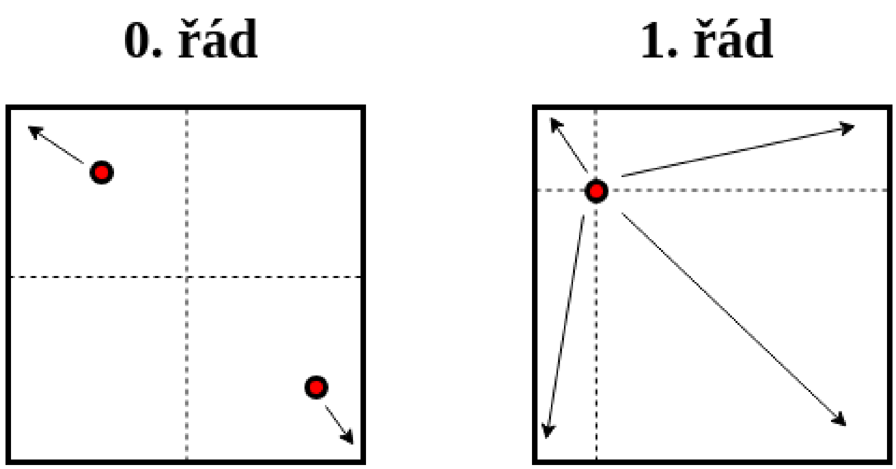
1. Váhování částic: $(x, v)_i \to (\rho, \vec{j})_j$,
2. Integrátor polí: $(\rho, \vec{j})_j \to (E, B)_j$,
3. Váhování polí: $(E, B)_j \to F_i$,
4. Integrátor částic: $F_i \to v_i \to x_i$.



Obr. 6: Schéma PIC cyklu.

2.1.1 Váhování částic

V prvním kroku z počátečního rozložení částic ve vypočtením prostoru se určí hustota náboje ρ a proudová hustota $\vec{j}$ ve vrcholech mříže. Na základě polohy musí být určeno do jakého vrcholu částice patří (tzv. váhování částic), což je možné provést vice způsoby. Při váhování nultého řádu (NGP [8]) částice se přiřadí celá do nejbližšího vrcholu, tento způsob je výpočetně nejjednodušší, ale může přivést k numerické nestabilitě algoritmu. Další metoda je tzv. váhování prvního řádu [7] ve kterém se částice přispívá do každého z čtyř nejbližších vrcholů relativně vzdálenosti od každého z těchto vrcholů. Obě metody jsou znázorněny schematický na Obr. 7.



Obr. 7: Schematické znázornění váhování 0. a 1. řádů.

2.1.2 Integrátor polí

Ve druhém kroku se ze znalosti nábojové a proudové hustoty v vrcholu buňky z Maxwellových rovnic numerický vypočítávají elektrické pole $\vec{E}$ a magnetické pole $\vec{B}$.

Při volbě časového kroku Δt tak, aby změna elektromagnetického pole za Δt byla malá je možné zjednodušit úlohu na výpočet Poissonových rovnic pro skalární potenciál φ a vektorový potenciál $\vec{A}$ [7]

$$\nabla\varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \nabla\vec{A} = -\mu_0\vec{j}, \tag{20}$$

ze kterých potom ve výsledku se určí elektrické a magnetické pole.

2.1.3 Váhování polí

V dalším kroku elektrické a magnetické pole ve vrcholech mřížky je interpolováno na částice uvnitř buňky, tj. pole z vrcholů je váhováno na částice (postup opačný váhování částic), a ze znalosti polí se poté určí Lorentzove sily působící na částice. Stejně jako pro váhování částic existují různé řády interpolace polí na částice.

2.1.4 Integrátor částic

Ve posledním kroku cyklu je každá částice simulace posouvána integrováním příslušných pohybových rovnic v časovém intervalu $(t_k, t_k + \Delta t)$. Pro výpočet se může používat např. leap-frog metoda [9].

2.2 Podmínky stability

Pro každou počítačovou simulaci je velice důležitá numerická stabilita výpočtů, kterou lze určit pomoci správného nastavení parametrů simulace. Pro PIC simulaci nejzákladnější parametry jsou časový krok Δt a prostorový krok Δx [10]. Pro této parametry existují podmínky stability nutné pro dosažení fyzikálně správného výsledku simulace.

Numerická nestabilita simulace se projevuje výsledky, které jsou fyzikálně nesmyslné pro danou úlohu, např. numerický ohřev vyvolány nefyzikálním zvýšením celkové energie simulované soustavy [10].

Courant-Fridrichs-Lewyho podmínka [11] je podmínka udávající vztah časového a prostorového kroků určující fyzikálně reálný pohyb elektromagnetické vlny. Podmínku se dá vyjádřit ve tvaru

$$u\Delta t \leq \Delta x, \tag{21}$$

kde u je rychlost šíření vlny, což v našem případě je rychlost světla ve vakuu c. CFL podmínka také nese v sobě informaci, že se během časového kroku částice může dostat nejdále do sousední buňky.

Další podmínka stability simulace je vztah, který udává omezení na časový krok v závislosti na plazmové frekvenci ω_p, při porušení této podmínky může dojit k numerickému ohřevu

$$\omega_p\Delta t \leq 2. \tag{22}$$

2.3 EPOCH

EPOCH (Extendable PIC Open Collaboration) je open source kód pro simulaci plasmatu metodou PIC vyvinutý na základě starší metody PSC (particle simulation code) ve Warwickské universitě. Pro paralelizaci je používán MPI (Message Passing Interface). Kód (včetně dokumentace) je ke stažení pro studenty a akademické pracovníky online [12] (je nutné přihlášení). Také je k dispozici manuál [13], podrobně popisující princip kódu, funkce a parametry.

Výhodou kódu, kromě jeho dostupnosti, je efektivní rozdělení výpočtů mezi dostupné procesory (dynamic load balancing), což urychluje celkový výpočet simulace. EPOCH může simulovat úlohy ve 1D, 2D a 3D.

Simulace se ovládá pomocí vstupního souboru **input.deck**, který musí být uložen ve výstupním adresáře. Struktura vstupního souboru je rozdělena na bloky, každý z nich popisuje určitou část vstupních parametrů nebo požadavků na výstup. Některé z použitých mnou bloků jsou:

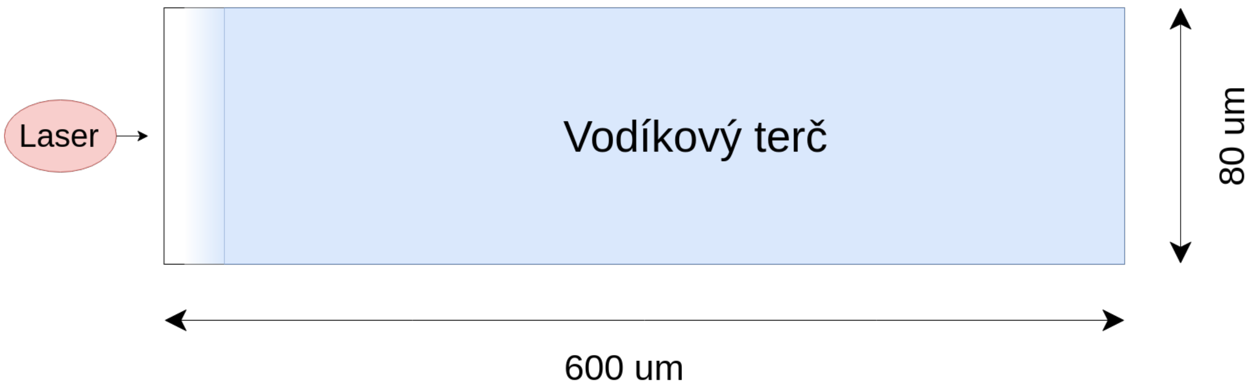
- *control* - popisuje setup simulaci,
- *boundaries* - udává informaci o okrajových podmínkách,
- *laser* - nese informaci o laseru,
- *species* - popisuje fyzikální částice přítomné v simulaci,
- *constant* - zahrnuje všechny zavedené nebo potřebné pro výpočet konstanty,
- *output* - upřesňuje požadavky na výstup simulace.

Výstupem simulace jsou **.sdf** (self-describing file) soubory, které následně můžou být zpracovány např. pomocí programu Matlab.

Kapitola 3

3 Simulace

Zadáním této práce je 2D simulace interakci ultrakrátkého laserového pulsu s plynovým terčem. Laserový puls propagující vakuem dopadá kolmo na vodíkový terč šířkou $d \approx 600\mu$m a hustotou elektronů $n_0 = 3.5 \cdot 10^{18}$ cm^{-3}. Na Obr. 8 je znázorněn celý simulační prostor.



Obr. 8: Schematické zadání prostoru simulace.

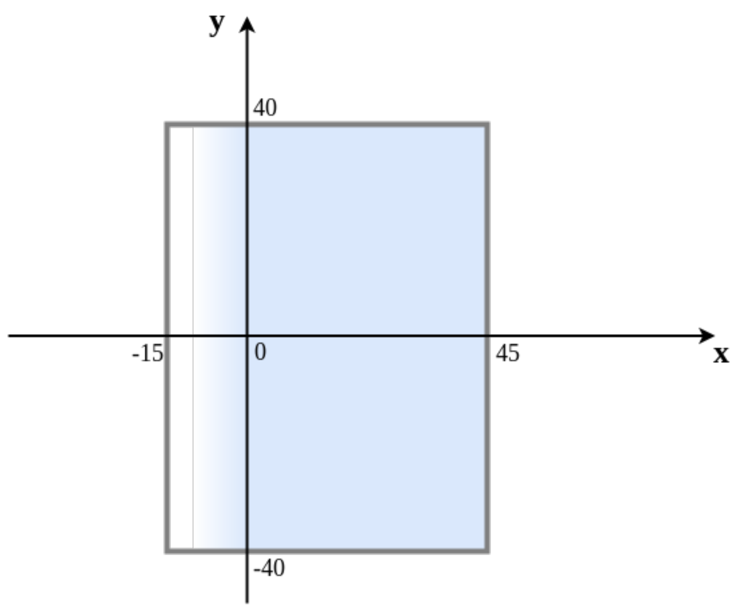
Dále jsou popsány a odůvodněny volba a nastavení jednotlivých parametrů vstupního souboru simulace, samotný soubor **input.deck** je k nahlédnutí v příloze na konci práce (5).

3.1 Setup parametry

Obr. 9: Schematické znázornění prostoru simulace s posouvajícím se s časem okénkem.

Na začátku je třeba určit nastavení *control* bloku: rozměr simulační plochy, rozměr buňky a čas průběhu simulace. Požadovaná šířka terče ($d \approx 600\mu$m) je relativně velká, a proto je výhodné použít tzv. *window* blok, jenž způsobuje posouvání výpočetní oblasti simulace s časem. Pomocí tohoto bloku je možné zmenšit interakční plochu. Obr. 9 schematicky ilustruje princip posuvného okénka.

Rozměr výpočetní plochy je 60μm ve směru x a 80μm v y. Začátek oblasti v ose x leží v bodě $x = -15\mu$m, v $x = -10\mu$m začíná lineární narůst hustoty vodíkového terče, který v $x = 0$ přechází na terč s konstantní hustotou. Výpočetní oblast na začátku simulace je znázorněna na Obr. 10.



Obr. 10: Výpočetní oblast na začátku simulace.

Pro numerickou stabilitu simulace je důležité správně určit rozměr buňky. Časový krok simulace je nastavován EPOCHem během výpočtu, proto platnost CFL (21) a frekvenční (22) podmínek je hlídaná při samotné práci kódu.

Další podmínka pro prostorový krok, která udává omezení na minimální rozlišení simulační plochy a největší možný rozměr buňky, je počet výpočetních buněk na plazmovou vlnovou délku. Je potřeba mít alespoň 10 buněk na λ_p na to, aby bylo možné obdržet správnou informaci o fyzikálních dějích v plazmatu. Proto jsem ze vztahů (8) a (9) určila délku plazmové vlny $\lambda_p \doteq 17.78\mu$m, což vede k hodnotě $\Delta x \approx 1\mu$m. Zvoleny v simulaci rozměry buňky jsou $\Delta x = 0.8\mu$m a $\Delta y = 0.6\mu$m. Počet pseudočástic jsem určila jako 1 částice na buňku.

Čas průběhu celé simulace jsem určila jako $t = 600\mu\text{m}/\,\text{c} = 2.0014$ps, kvůli pohybu laserového pulsu rychlosti světla.

3.2 Nastavení laseru a částic

Laser propaguje do prostoru simulace ve směru osy x ze záporných hodnot ke kladným. Vlnová délka laseru je $\lambda = 800$nm, intensita je $I = 10^{19}$ W/cm^2, polarizace je ve směru osy y ($\vec{i_e} = [0, 1, 0]$). Prostorový a časový profily laserového pulsu jsou Gaussovské, hodnota nejmenšího poloměru svazku $\omega_{bwr} = 25\mu$m, čas trvání pulsu $\tau = 35$ fs.

Blok *window* popisující pohyb interakční plochy je nastaven tak, že okno se začne pohybovat po čase $t = \tau/2.3 + \lambda(x_{max} - x_{min})/\,\text{c}$, kde τ a λ jsou parametry laseru,

x_{max} a x_{min} jsou okrajové koordináty osy x interakční oblasti na začátku simulace, tj. okno začne svůj pohyb po tom jak laserový puls vyletí z interakční oblasti. Okénko pronásleduje laserový svazek, proto jeho rychlost pohybu je definována jako rychlost světla c.

Protony ve vodíkovém plynu jsem považovala za nehybné, kvůli velké hmotnosti $m_p = 1.67 \cdot 10^{-27}$kg oproti hmotnosti elektronů $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$kg a tudíž zanedbatelného působení pondomotorické sily, proto pro jednoduchost vypočtu v bloku *species* jsou zadefinovány pouze elektrony s hustotou $n_e = 3.5 \cdot 10^{18}$ cm^{-3}.

3.3 Nastavení výstupu simulace

V bloku *output* se nastavuje jak často výsledky budou uloženy do **.sdf** souborů a jaké vypočítané v simulaci proměnné budou přidány.

Pomocí definování proměnné $dt\_snapshot = 20e^{-15}$, jsem nastavila ukládaní výstupu na každých 20 fs. Do **.sdf** se zapisovali proměnné

- *particles* - poloha částic,
- *px*, *py* - hybnost ve směru x a y,
- *grid* - poloha proměnných mřížky,
- *ex*, *ey* - vektory elektrického pole ve směrech x a y,
- *particle_energy* - kinetická energie částic,
- *number_density* - hustota částic na mřížce (odvozená proměnná).

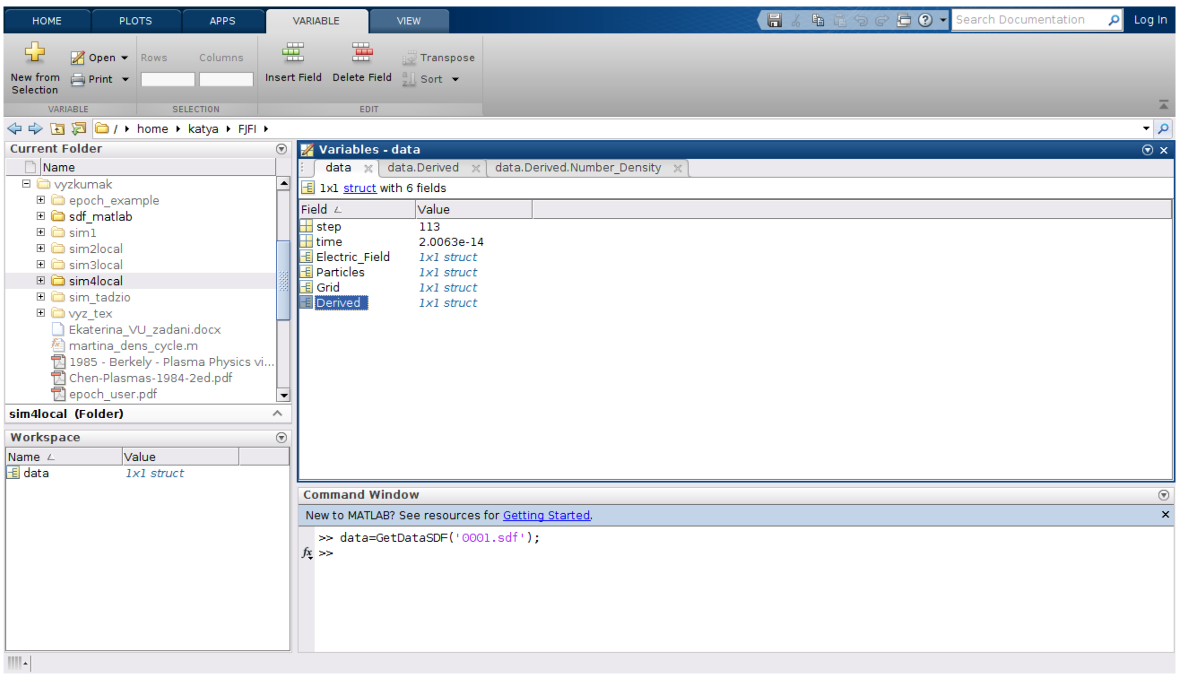
Kapitola 4

4 Zpracování výsledků

Simulace běžela celkem 1 hodinu 12 minut a 3.43 vteřiny, na výpočet bylo využit jeden výpočetní element. Ve výsledku jsem dostala 102 **.sdf** souborů.

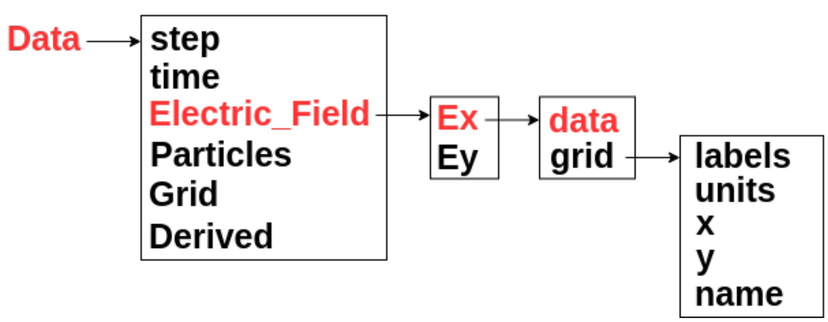
4.1 Zpracování .sdf souborů

Soubory **.sdf** jsem zpracovávala pomocí programu Matlab. Pro převod dat z **.sdf** do formátu Matlabu jsem použila soubor **GetDataSDF.m**, který mi poskytl vedoucí. Na Obr. 11 je znázornění zpracování souboru pomocí funkce *GetDataSDF*.



Obr. 11: Převod **.sdf** souboru na proměnnou programu Matlab.

Proměnná zahrnující v sebe hodnoty všech vypočítaných v určitém časovém kroku simulace veličin tvoří stromovou strukturu. Obr. 12 ilustruje strukturu proměnné na příkladě cesty k hodnotě elektrického pole ve směru osy x - **Data.Electric_Field.Ex.data**.



Obr. 12: Stromová struktura proměnné **Data** v programu Matlab.

4.2 Práce v Matlabu

Pro vykreslení grafů různých veličin jsem vytvořila Matlab funkce, např. při zpracování hodnot pro hustotu jsem použila skript 6. Pro zpracování elektrického pole ve směru x jsem pouze modifikovala 6. Také pomocí skriptu 7 jsem vykreslila řez hustoty a elektrického pole v $y = 0$. V paragrafu 4.3 jsem znázornila a popsala výsledky simulace zpracovány pomocí těchto skript v Matlabu.

4.3 Výsledky

Po zpracování výstupních souborů simulace (pomocí např. 6) jsem dostala grafické znázornění určitých veličin pro každý časový krok, tzn. 102 obrázky pro každou zvolenou proměnnou. Z tohoto velkého množství pro stručnost popisu jsem vybrala pouze několik grafů pro každou veličinu v různých časových krocích, které jsou znázorněny dále v tomto paragrafu.

Na Obr. 13 je vykreslena hustota elektronů v různé časové kroky simulace. Z obrázků je vidět jak vzniká vlna v plazmatu buzená laserem.

Při zpracování elektrického pole ve směru pohybu laseru jsem dostala výsledky představené na Obr. 14. Na příkladě E_x je také vidět vytváření plazmové vlny, přičemž z obrázky se dá předpokládat, že vzbuzená vlna je nelineární.

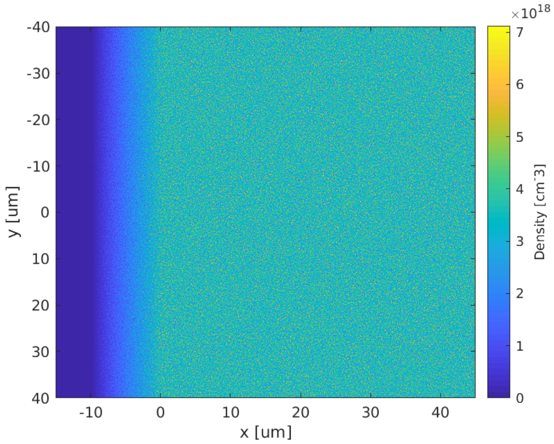
Pro znázornění nelineárního průběhu buzené plasmové vlny jsem vykreslila $\Delta n_e/n_0$ - normované počáteční hustotou $n_0 = 3.5 \cdot 10^{24} \mathrm{m}^{-3}$ nasimulované hodnoty změny hustoty elektronů a E_x/E_p - vypočítané elektrické pole ve směru x podělené nerelativistickým wavebreaking polem E_p (18) na přímce $y = 0$. Pomocí vzorců (18) a (8) a s použitím konstant uvedených v Tab. 1 jsem spočítala hodnotu $E_p = 1.8826 \cdot 10^{11}$ Vm^{-1}. Na Obr. 15 je graf pro $\Delta n_e/n_0$ a E_x/E_p v čase $t = 2.2016 \cdot 10^2$fs. Z průběhu elektrického pole E_x/E_p je velmi dobře vidět nelineární chování plazmové vlny.

e_0	1.602177 C
m_e	9.109384 kg
ϵ_0	8.854188 F m^{-1}
c	299792458 m s^{-1}

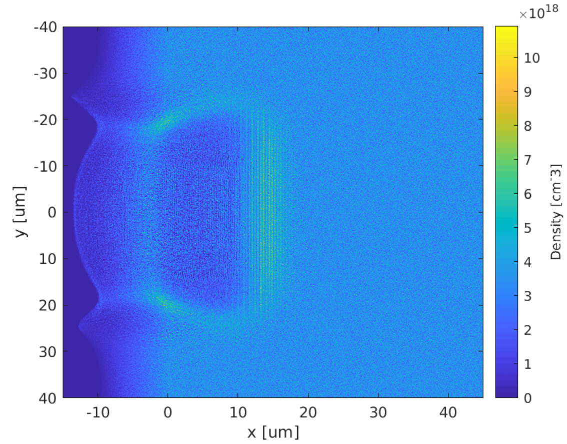
Tab. 1: Konstanty použité ve výpočtech.

Ze vztahu (17) je možné zpětně určit normalizovaný vektorový potenciál a_0, z grafu Obr. 15 je vidět, že $E_{wake}/E_p \approx 1$, po dosazení do rovnice (17) a volení kladného kořene řešení rovnice jsem dostala zpětně hodnotu $a_0 = 1.7989$. Hodnota spočítaná pomocí vzorce (14) a hodnot $\lambda = 0.8\mu$m a $I = 10^{-1}$ Wcm^{-2} je $a_0 = 2.1630$. Hodnota spočítána z výsledku simulace přibližně odpovídá hodnotě z laserových parametrů, i když je o 0.3641 menší, kvůli tomu, že hodnota intenzity laseru I je vrcholová intenzita a klesá jak s časem, tak i s polohou a výsledné a_0 je menší v závislosti na těchto parametrech.

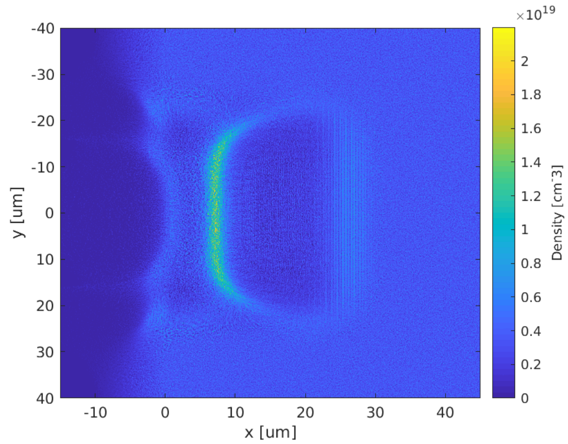
Pomocí vztahu (19) s použitím vztahu (11) jsem určila wave-breaking limit pro nasimulovanou plasmovou vlnu $E_{wb} = 1.2305 \cdot 10^{12}$ Vm^{-1}. Z Obr. 14 je vidět, že nasimulované hodnoty podélného elektrického pole jsou řádově $\sim 10^{11}$, je z toho vidět, že k překlopení vlny v simulaci nedochází.



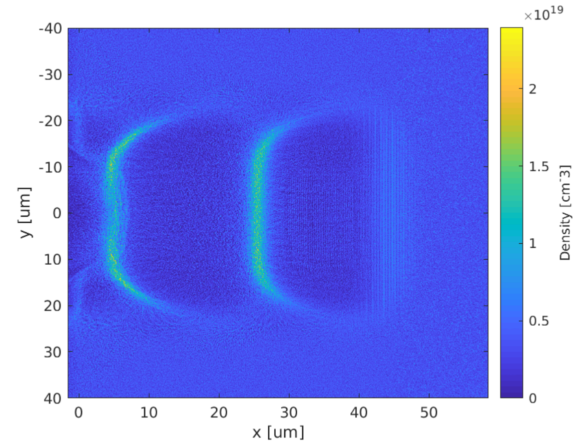
(a) $t = 8.8775 \cdot 10^{-2}$fs



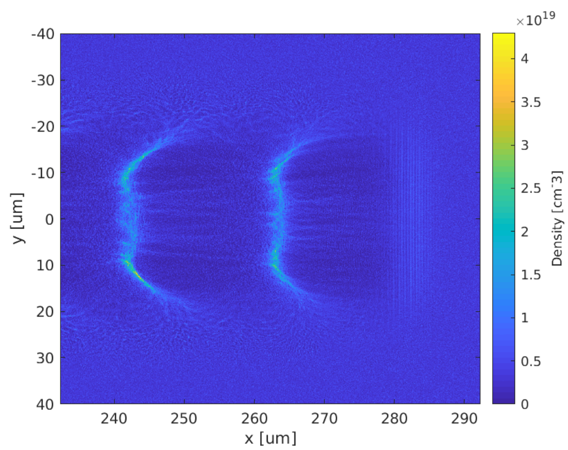
(b) $t = 1.2002 \cdot 10^{2}$fs



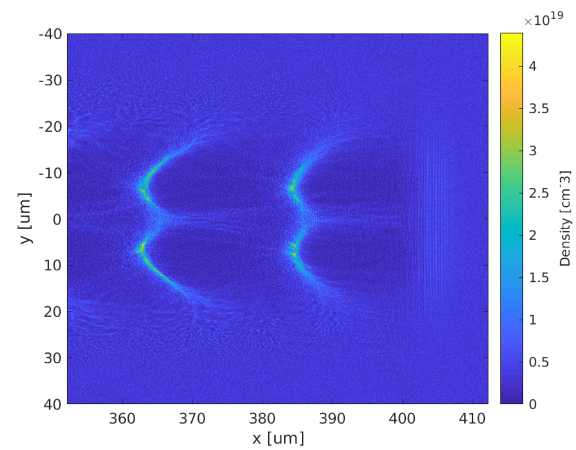
(c) $t = 1.6015 \cdot 10^{2}$fs



(d) $t = 2.2016 \cdot 10^{2}$fs

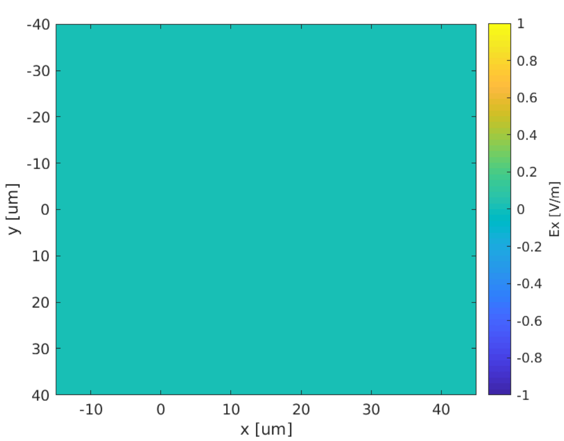


(e) $t = 1.0001 \cdot 10^{3}$fs

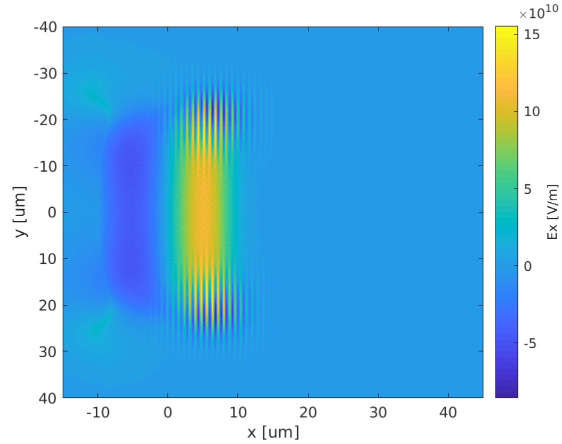


(f) $t = 1.4002 \cdot 10^{3}$fs

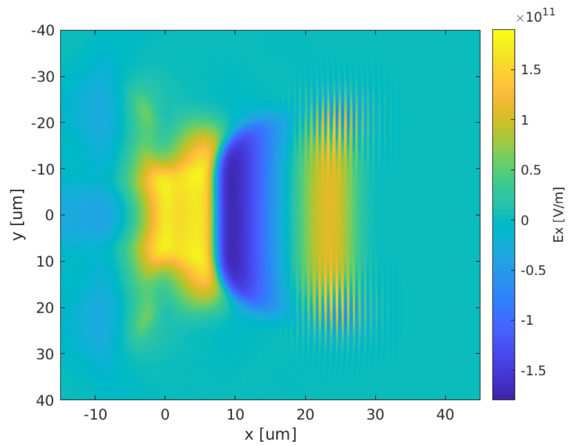
Obr. 13: Změna hustoty elektronů pro různé časové kroky simulace.



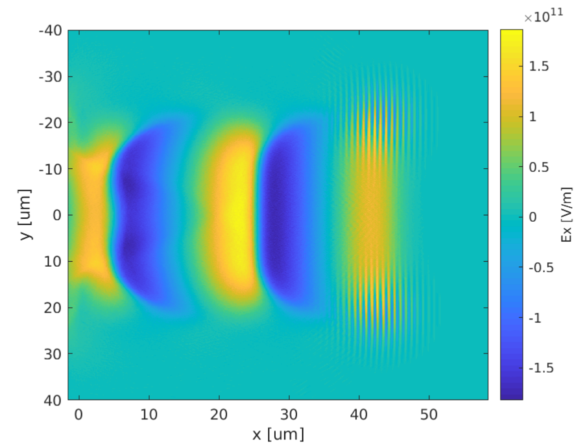
(a) $t = 8.8775 \cdot 10^{-2}\text{fs}$



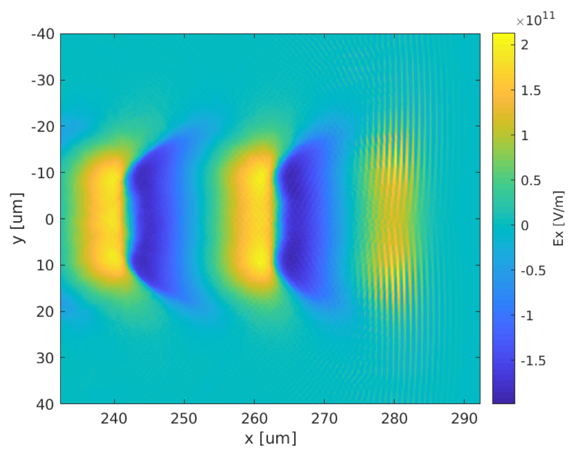
(b) $t = 1.0014 \cdot 10^{2}\text{fs}$



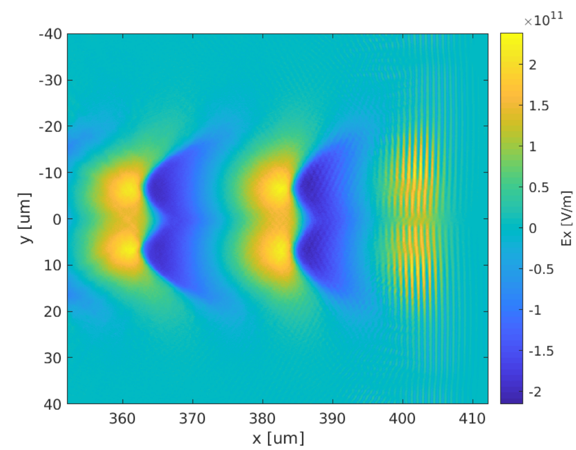
(c) $t = 1.6015 \cdot 10^{2}\text{fs}$



(d) $t = 2.2016 \cdot input.deck10^{2}\text{fs}$

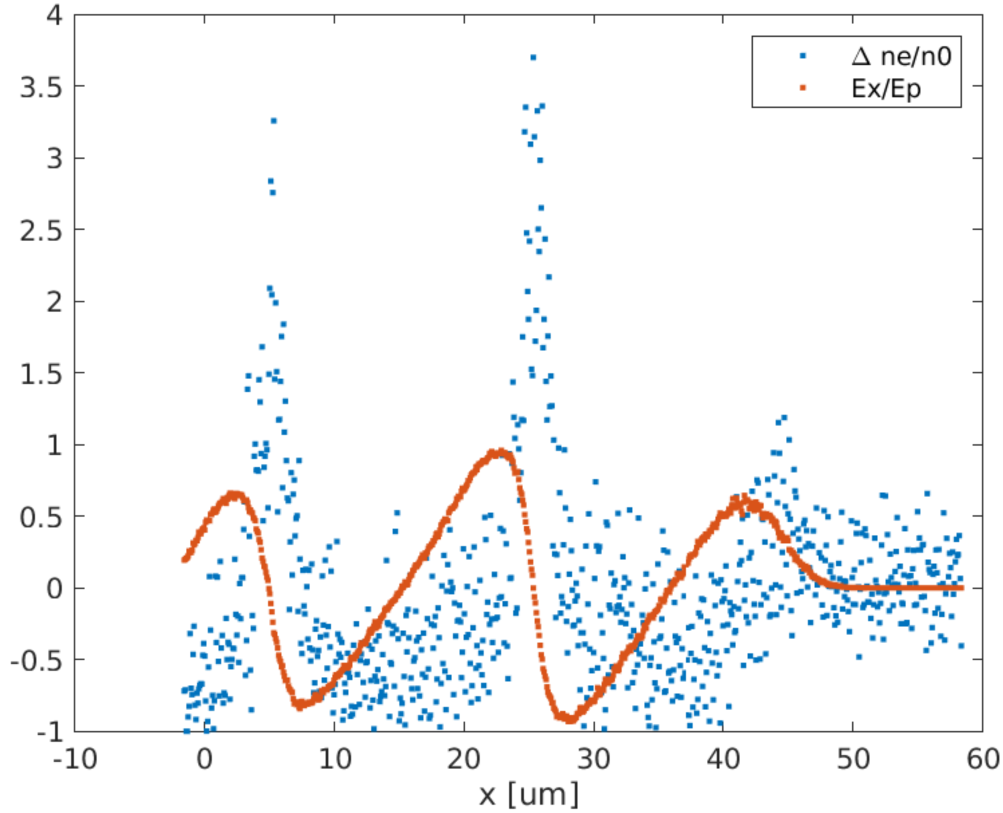


(e) $t = 1.0001 \cdot 10^{3}\text{fs}$



(f) $t = 1.4002 \cdot 10^{3}\text{fs}$

Obr. 14: Změna elektrického pole ve směru propagace laseru E_x pro různé časové kroky simulace.



Obr. 15: Řez přímkou $y = 0$ pro veličiny $\Delta n_e/n_0$ a E_x/E_p v čase $t = 2.2016 \cdot 10^2$fs.

Závěr

V první kapitole této práce jsem uvedla základní pojmy potřebné pro popis laserového pulsu a plazmatu, dále jsem popsala pohyb elektronů v poli laseru a působení ponderomotorické síly a také fyzikální principy buzení lineárních a nelineárních vln v plazmatu laserem.

Druhá kapitola představuje teoretický popis Particle-In-Cell metody používané pro numerický výpočet interakce laseru s plazmatem, popsala jsem základní cyklus metody a uvedla jsem podmínky pro stabilitu výpočtu. Také jsem uvedla stručný popis využitého pro simulaci kódu EPOCH a udala jsem některé parametry pro vstupní **input.deck** soubor tohoto kódu.

Fyzikální úlohu jsem zadala na začátku třetí části. Parametry vstupního souboru simulace jsem navrhovala tak, že by byly splněny podmínky stability uvedené v druhé kapitole. Podrobný popis parametru jsem udala dále v třetí kapitole a také v příloze (5) jsem uvedla **input.deck** soubor ze kterého jsem spouštěla simulaci.

Výsledky simulace jsem zpracovávala pomocí programu Matlab. Každý výstupní soubor odpovídal stavu, zvolených v nastavení výsledných veličin v určitém časovém kroku. Všechny soubory jsem převáděla na format Matlabu a zpracovávala pomocí skript představených v příloze (6,7). Vykreslila jsem průběh změny hustoty elektronů a elektrického pole ve směru propagace laseru E_x, kvůli velkému počtu výstupních dat jsem vybrala pouze několik grafů v určité časové kroky pro každou veličinu. Grafy jsou znázorněny na Obr. 13 a Obr. 14. Z Obr. 14 už je vidět, že průběh vzbuzených laserem vln je nelineární, pro lepší znázornění tohoto faktu na Obr. 15 jsem vynesla závislosti $\Delta n_e/n_0$ a E_x/E_p, ze kterého už je zřejmá nelinearita vln. Pomocí hodnoty limity $E_{wb} = 1.2305 \cdot 10^{12}$ Vm^{-1} jsem také ukázala, že k překlopení nelineární vlny v simulaci nedochází.

Použitá literatura

[1] VRBOVÁ, Miroslava; *Úvod do laserové techniky.* Praha: Vydavatelství ČVUT, 1998. ISBN 80-01-01108-9.

[2] WikipediA, The Free Encyclopedia. *Gaussian beam* [online]. 19.08.2019 [cit.16.09.19]. Dostupné z https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_beam

[3] CHEN, Francis. *Úvod do fyziky plazmatu.* Praha: Academia, 1984.

[4] CROS, B. Laser-driven Plasma Wakefield: Propogation Effects. In: Proceedings of the CAS-CERN Accelerator School: Plasma Wake Acceleration. Ženeva: CERN, 2014, s. 207-230.ISSN 0007-8328.

[5] KRŮS, Miroslav.*Electron beam acceleration with femtosecond lasers for generation of secondary femtosecond X-ray sources.* Praha, 2015. Disertační práce. České vysoké učení technické v Praze. Fakulta jaderná a fyzikální inženýrská. Katedra fyzikální elektroniky.

[6] SCHLENVOIGT, Hans Peter. Laser-based Particle Acceleration. In: *Advances in Solid-State Lasers: Development and Applications.* Chorvatsko: INTECH, únor 2010, s. 565 - 608. ISBN 9789537619800

[7] KULHÁNEK, Petr. *Úvod do teorie plazmatu.* Praha: AGA, 2017. ISBN 978-80904582-2-2

[8] HRACH, Rudolf. *Počítačová fyzika I.* Ústí nad Labem : PF UJEP, 2003.

[9] FILIPIČ, Gregor. *Principles of "Particle in Cell" simulations.* University of Ljubljana: Faculty for mathematic and physics, 2008.

[10] KOCUR, Viktor. *Numerická přesnost a časová náročnost vícedimenzionálních particle-in-cell simulací ve fyzice laserového plazmatu.* Praha, 2016. Výzkumný úkol. České vysoké učení technické v Praze. Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská. Katedra fyzikální elektroniky.

[11] COURANT, Richard. On the partial difference equations of mathematical physics. *Mathematische Annalen.* 1928, 100(1), s. 32-74. ISSN 0025-5831.

[12] CCP-Plasma. [online]. [cit.28.03.19] http://www.ccpp.ac.uk/codes.html

[13] BENNETT, Keith; *Users Manual for the EPOCH PIC codes.* University of Warwick, 2015.

Příloha

5 EPOCH input soubor

input.deck

```
begin:constant
  lambda       = 0.8 * micron          # laser wavelength
  omega        = 25 * micron           # laser beam waist, 1/e2 diameter
  density_crit = critical(omega)       # electron critical density
  density_max  = 10.0 * density_crit   # maximum initial electron density
  dens0        = 3.5*1e18  *1e6        # electron density in fully ionized H (m^-3)
  tao          = 35      *1e-15        # laser pulse duration
  tao_laser    = tao/2.3               #
  waist2x      = 50      *1e-6         # laser focus width
  sigma_waist  = waist2x/2.3           #
  delay        = 2*tao_laser
  win_start    = delay/2 + 0.8*(x_max-x_min)/c
  intensitad   = 1e19                  # laser intensity (w cm2)
end:constant
#------------------------------------------------------------------------------------
begin:control
  nx = 800              # cell x size 1e-7
  ny = 600              # cell y size 1e-7
  npart = nx*ny         # 1 particle in each cell ???
  t_end = 600*micron/c  # total time until pulse is at the
  x_min = -15 * micron
  x_max =  45 * micron
  y_min = -40 * micron
  y_max =  40 * micron
  field_order = 4
  neutral_background=T
end:control
#------------------------------------------------------------------------------------
begin:boundaries
  bc_x_min          = simple_laser
  bc_x_max          = simple_outflow
  bc_y_min          = simple_outflow
  bc_y_max          = simple_outflow
 end:boundaries
#------------------------------------------------------------------------------------
begin:window
   move_window               =  T
   window_v_x                =  c
   window_start_time        =  win_start
   bc_x_min_after_move  =  simple_outflow
   bc_x_max_after_move  =  periodic
end:window
#------------------------------------------------------------------------------------
begin:laser
  boundary = x_min
  lambda = lambda
  intensity_w_cm2 = intensitad
  pol = 0.0
  profile = supergauss(y,0.0,sigma_waist,5)   #profile = gauss(y,0.0,sigma_waist)
  t_profile = gauss(time,delay,tao_laser)
```

```
  t_start   = start
  t_end     = end
end:laser
#-------------------------------------------------------------------------------------
begin:species
  name = electron
  charge = -1.0
  mass = 1.0
  frac = 1
 density = if( (x gt -10*1e-6 and x lt 0), dens0*(x*1e5 +1), 0)
 density = if( (x gt 0), dens0, density(electron))
end:species
#-------------------------------------------------------------------------------------
begin:output
  dt_snapshot = 20e-15 #number of timesteps between output dumps
  full_dump_every = never   #Number of dt_snapshot between full dumps
  force_final_to_be_restartable = T
  particles      = always + species
  vx             = never #always + species
  vy             = never #always + species
  pz             = never #always + species
  px             = always + species
  py             = always + species
  vz             = never #always + species
  charge         = never #always + species
  mass           = never #always + species
  species_id     = never #always + species
  particle_weight= never #always + species
  grid = always + species
  ex   = always
  ey   = always
  ez   = never
  bx   = never #always
  by   = never #always
  bz   = never #always
  jx   = never #always + species
  jy   = never #always + species
  jz   = never #
  number_density   = always + species
  particle_energy  = always + species
end:output
```

6 MATLAB soubor pro hustotu

density.m

```
function density

clear all;
 for j=0:101
   if j < 10
     cisloSDF=sprintf('000%d.sdf',j);
   elseif j < 100
     cisloSDF=sprintf('00%d.sdf',j);
   else
     cisloSDF=sprintf('0%d.sdf',j);
   end

l=GetDataSDF(cisloSDF);

dens=l.Derived.Number_Density.data;
dens=dens./1e6;
x=l.Derived.Number_Density.grid.x;
x=x.*1e6;
y=l.Derived.Number_Density.grid.y;
y=y.*1e6;

n=figure;
h=imagesc(x,y,dens');
xlabel('x [um]');
ylabel('y [um]');
k=colorbar;
ylabel(k,'Density [cm^-3]');

if j < 10
 saveas(gcf,sprintf('/home/EPOCHsim/Density/dens-0%i',j),'png');
else
 saveas(gcf,sprintf('/home/EPOCHsim/Density/dens-%i',j),'png');
end
           delete(k);
        delete(h);
        delete(n);
   close;
 end
end
```

7 MATLAB soubor pro n_e a E_x

exdensity.m

```
function exdensity
clear all;

e=1.602177*1e-19;                       %electron charge [C]
me=9.109384*1e-31;                      %electron mass [kg]
epsilon=8.0854188*1e-12;                 %vacuum permitivity [F/m]
ne=3.5*1e24;                                  %electron density [m-3]
wp= sqrt((ne*e^2)/(me*epsilon));        %plasma frequency
ep= (physconst('LightSpeed')*me*wp)/e; %nonrelativistic wavebreaking field


 for j=0:101
   if j < 10
     cisloSDF=sprintf('000%d.sdf',j);
   elseif j < 100
     cisloSDF=sprintf('00%d.sdf',j);
   else
     cisloSDF=sprintf('0%d.sdf',j);
   end

l=GetDataSDF(cisloSDF);

dens=l.Derived.Number_Density.data(:,300);
dens=(dens - ne)./(ne);
elpole=l.Electric_Field.Ex.data(:,300);
elpole=elpole./(ep);
x=l.Derived.Number_Density.grid.x(1:800);
x=x.*1e6;


n=figure;
h=plot(x,dens,'.');
hold on;
plot(x,elpole,'.');

xlabel('x [um]');
legend('\Delta ne/n0', 'Ex/Ep');

  if j < 10
     saveas(gcf,sprintf('/home/EPOCHsim/ExDensity/fig0%i',j),'png');
  else
     saveas(gcf,sprintf('/home/EPOCHsim/ExDensity/fig%i',j),'png');
  end
        delete(h);
        delete(n);
   close;
 end
end
```