

# Le calcul HPC pour la modélisation de faisceaux d'accélérateurs de nouvelle génération

*Romuald Duperrier  
Laboratoire d'Etude et  
Développement pour les Accélérateur  
CEA / Saclay*

# Les accélérateurs: un outil pluridisciplinaire

Domaine	Méthodes	Buts
Recherche (autre que médecine)	Faisceaux énergétiques	Exploration de la matière
Médecine	Production de radioisotopes	Imagerie, traceurs
Médecine	Irradiations X, $\gamma$ , $p$ , $e$ , ions lourds	Radiothérapie
Electronique	Faisceaux électroniques	Gravure de circuits
Métallurgie	Faisceaux électroniques	Soudure
Sécurité alimentaires	Irradiations d'aliments	Stérilisation
Archéologie	Spectrométrie de masse	Datation

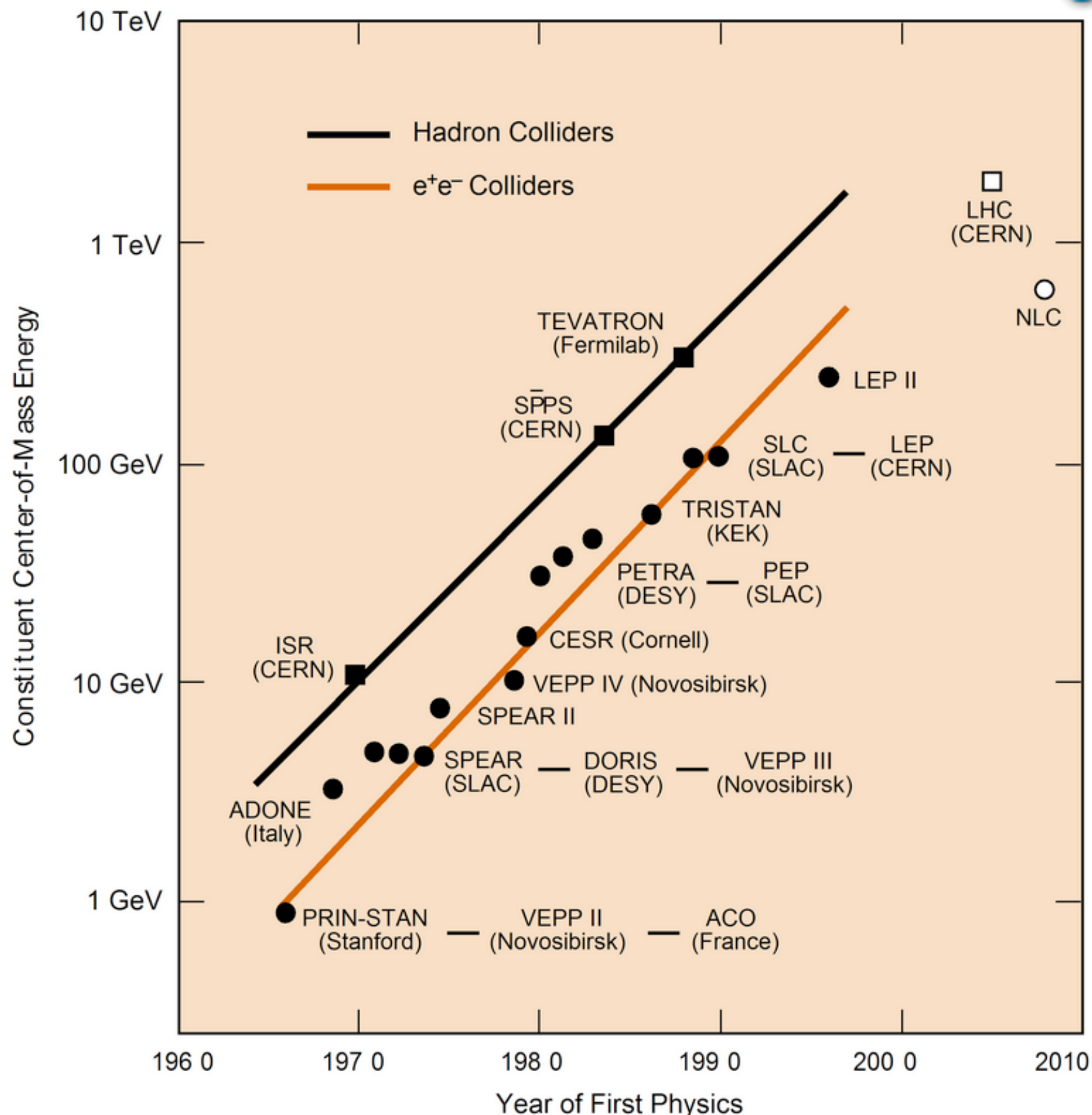
# Les accélérateurs: un outil de recherche

Recherche	Méthodes	Accélérateurs
Physique des particules	Collisions	Anneau ou linéaire à p et/ou e
Physique nucléaire	Collisions noyau/noyau	Anneau, linéaire et cyclotron
Matière condensée	Diffraction d'X	Anneau ou linéaire d'e comme source X
Matière condensée	Diffusion de neutrons	Linéaire à protons
Biologie, chimie	Cristallographie de protéines, virus	Anneau ou linéaire d'e comme source X
Physique des matériaux	Analyse par activation	Van de Graff ou tandem

# Les performances au cours du siècle passé

- Notamment pour la physique des particules, c'est la course aux plus hautes énergies tout en cherchant à augmenter la brillance pour une énergie donnée.

- Pour certaines applications (matière condensée), l'augmentation du flux passe plus par une augmentation de l'intensité plus que par l'énergie.



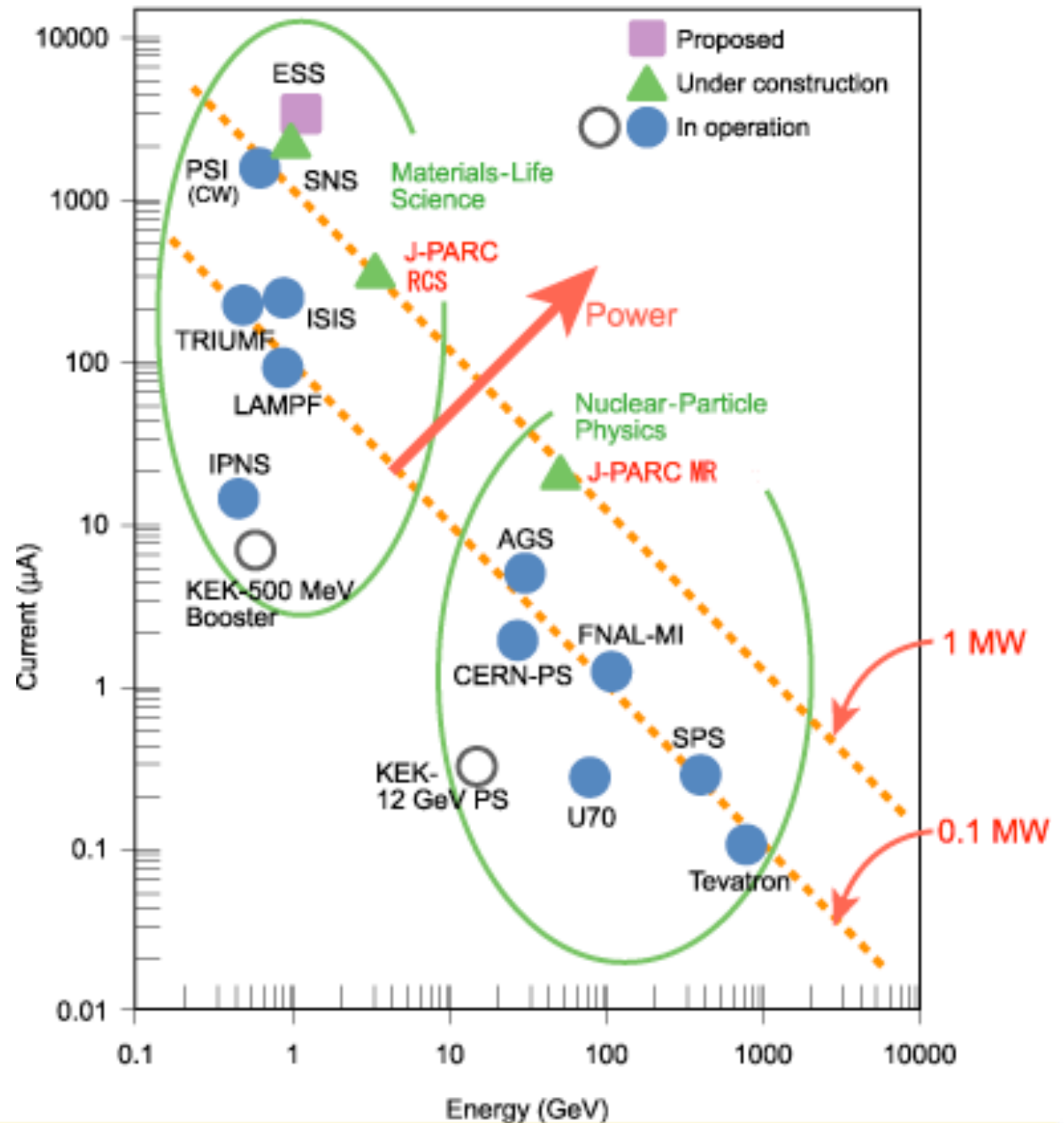


# Les performances au cours du siècle passé

- Notamment pour la physique des particules, c'est la course aux plus hautes énergies tout en cherchant à augmenter la brillance pour une énergie donnée.

- Pour certaines applications (matière condensée), l'augmentation du flux passe plus par une augmentation de l'intensité plus que par l'énergie.

Power map of worldwide proton accelerators



# Les défis associés à cette course à la puissance

- L'augmentation de la puissance par l'intensité s'est traduit par la nécessité de prendre en compte le faisceau comme source de champs électromagnétiques:

## Caractéristique de l'accélérateur

## Effet

collisionneur

faisceau-faisceau

à haute densité de charge

charge d'espace

à forte intensité

champs de sillage

- Cette augmentation de l'intensité implique des pertes relatives de plus en plus faibles. Il devient nécessaire de prendre en compte de nouveaux processus jusqu'alors négligés ("au delà de Maxwell"):

## Processus

## Effet

émission secondaire ou de champ

courant d'obscurité, avalanche

interaction gaz résiduel

charge d'espace, diffusion

contrôle dynamique

défauts transitoires

I r f u

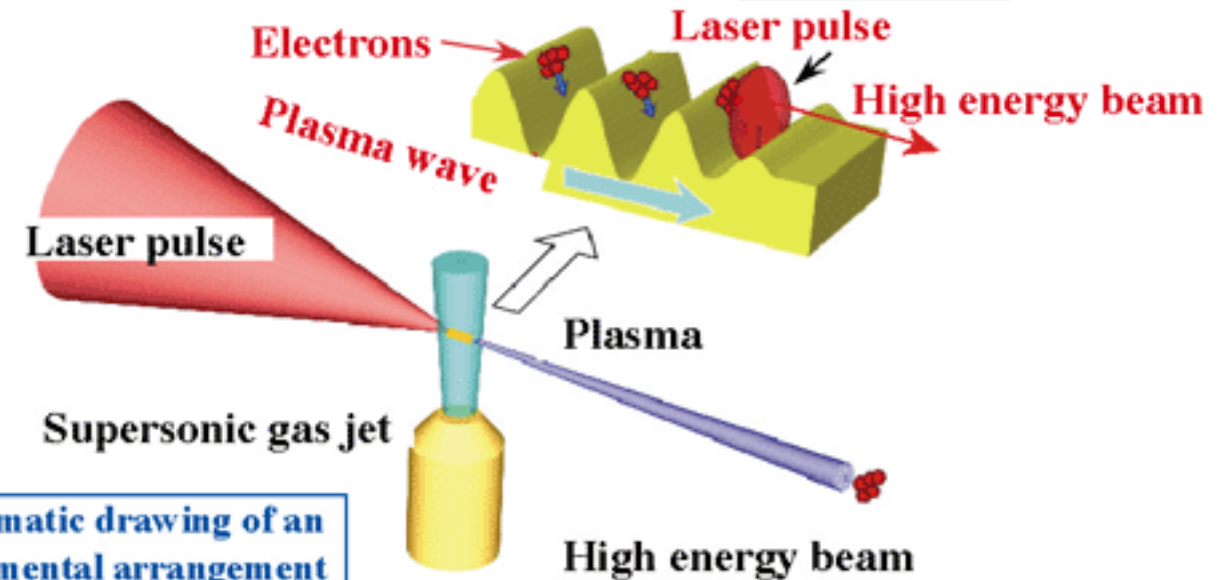
cea

saclay

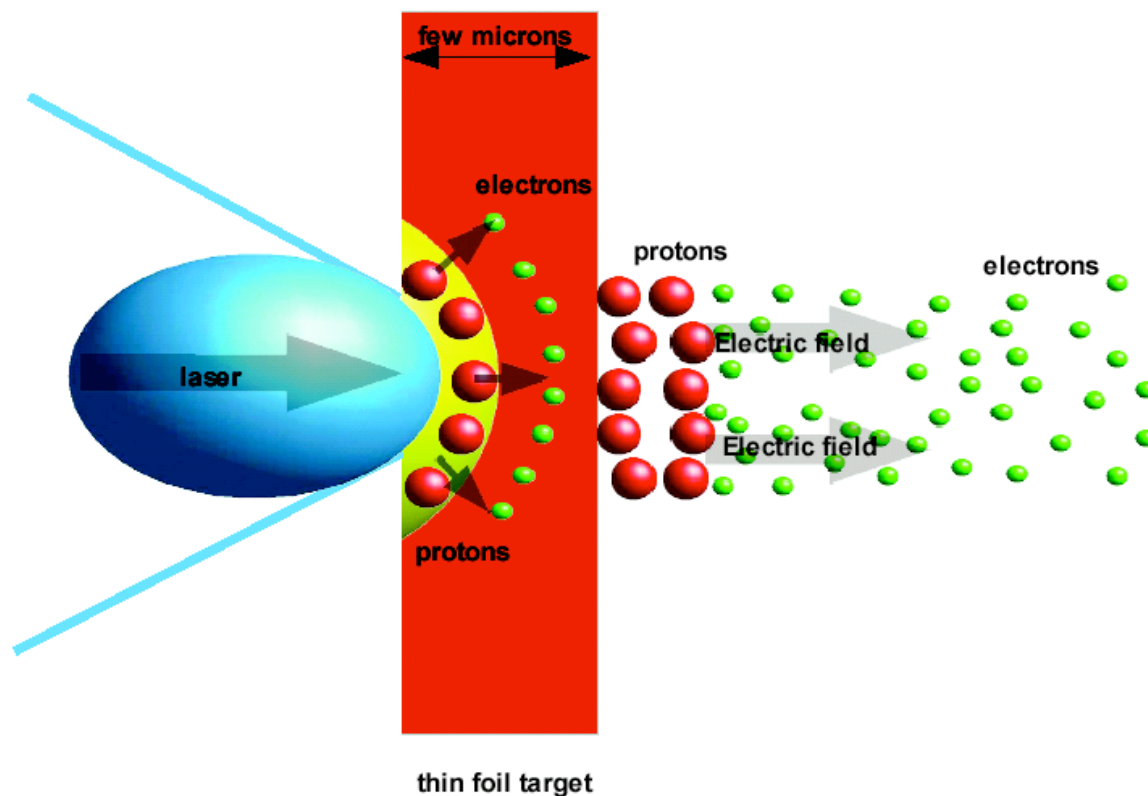
# Les nouvelles techniques d'accélération

- Dans un gaz, le passage de l'impulsion laser perturbe la densité électronique. Le laser permet ainsi de générer une onde plasma qui se propage dans la direction du laser et qui permet d'obtenir des champs électriques longitudinaux supérieurs au GV/m dans un milieu déjà claquée.

A schematic drawing of the principle of acceleration



A schematic drawing of an experimental arrangement



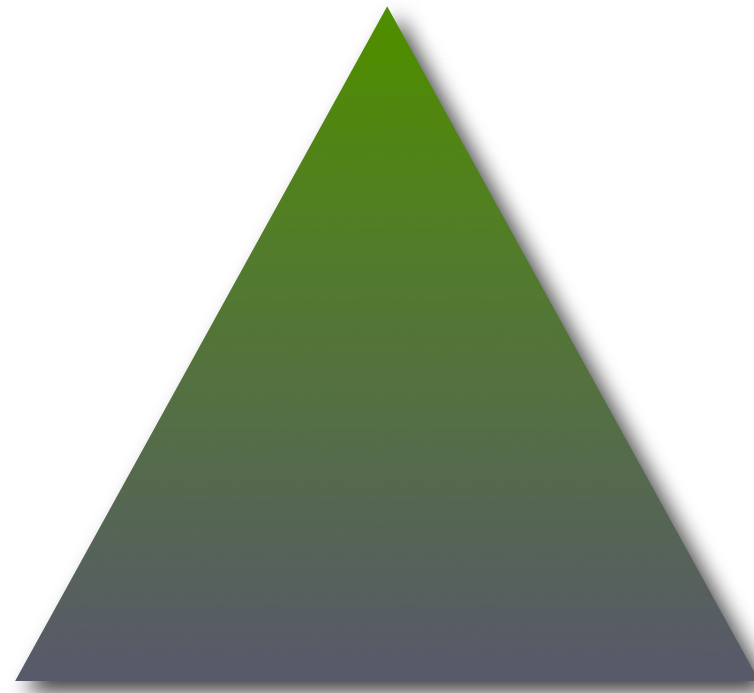
- A l'aide de lasers ultra courts ( $< \text{ps}$ ) et ultra-intenses ( $I > 10^{18} \text{ W/cm}^2$ ), il est possible de générer des faisceaux de particules chargées à des énergies élevées (jusqu'à plusieurs dizaines de MeV).

- La complexité des interactions en jeu est difficilement approchée par une résolution analytique et les observables expérimentales apportent une réponse globalisée et limitée.

# L'émergence d'une nouvelle discipline...

I r f u  
cea  
saclay

**Simulation**



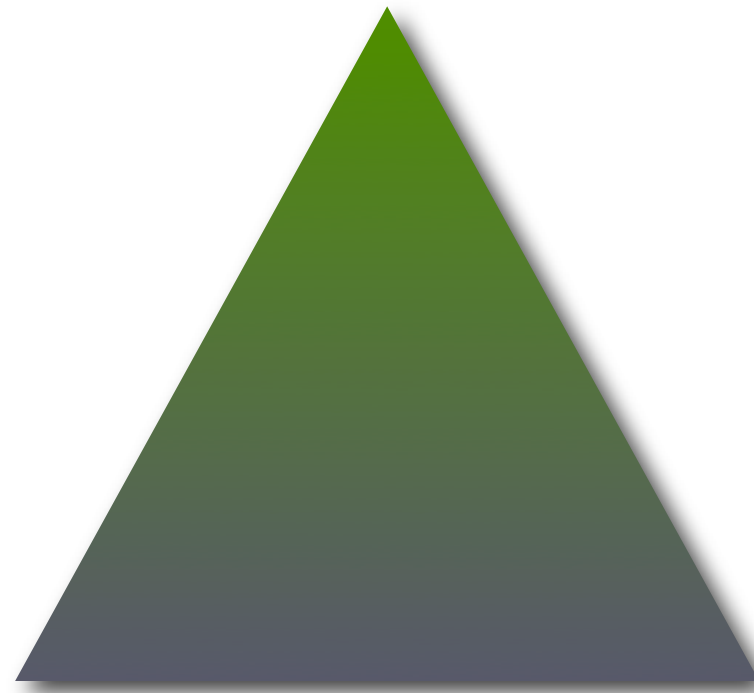
**Théorie**

**Expérience**



...ou prolongation de l'expérience?

**Théorie**



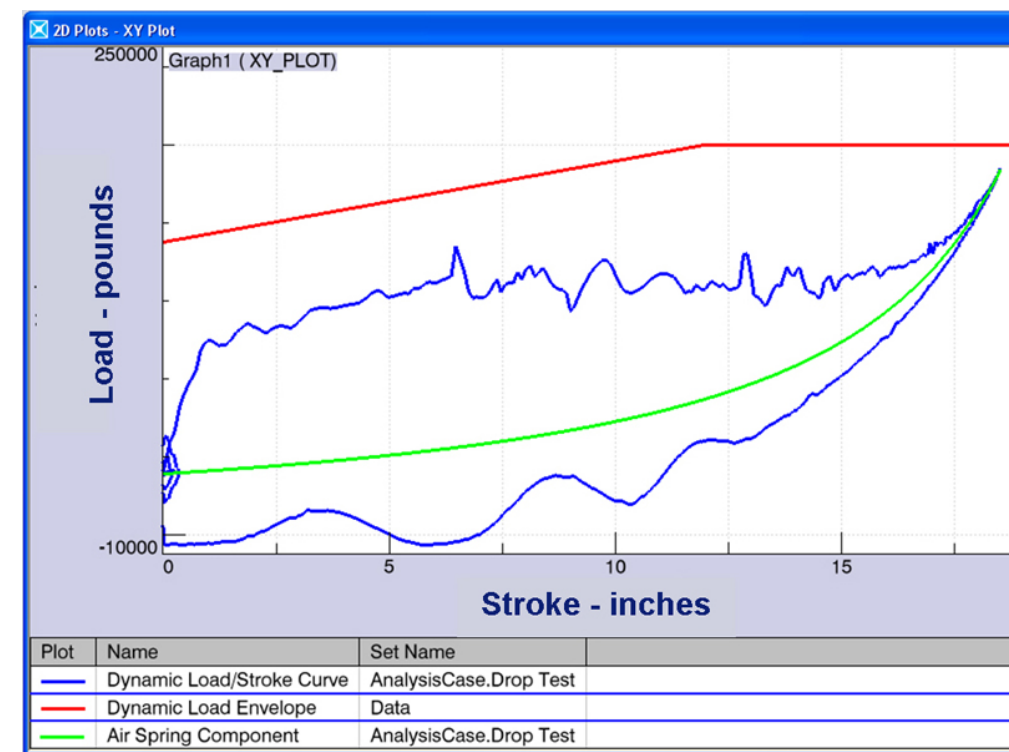
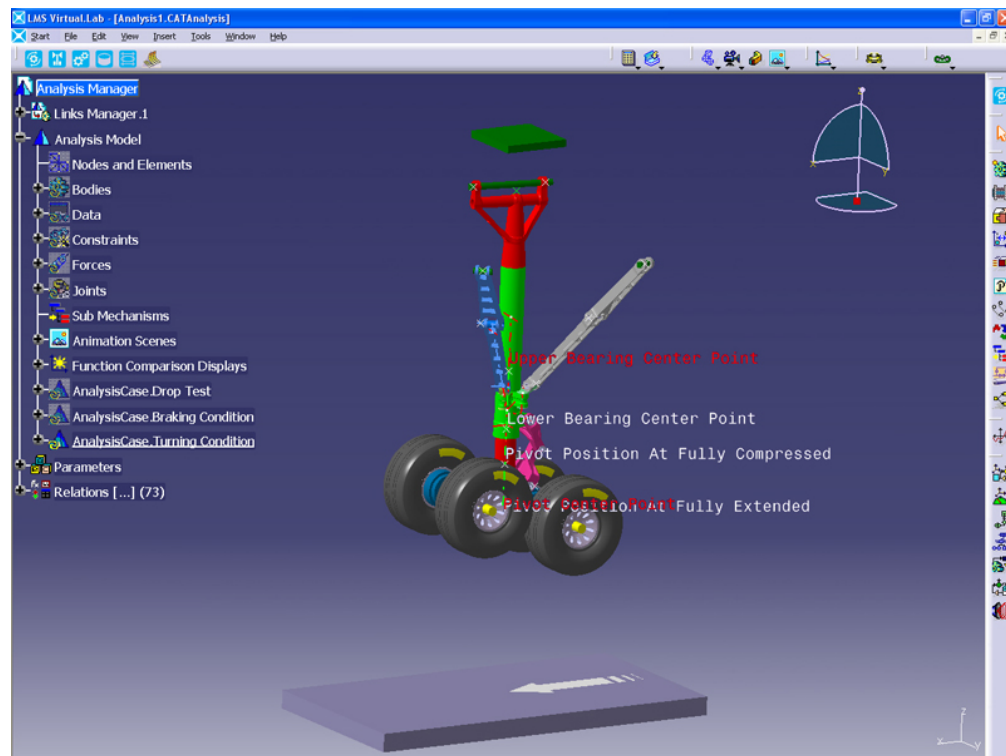
**Expérience virtuelle**

**Expérience pratique**

Avec une pertinence assujettie au talent de l'expérimentateur

# Réduire les coûts, le risque

- Les accélérateurs sont des outils essentiels pour les découvertes futures.
- Au regard de la liste des futures installations pour la science aux Etats Unis, près de 50% utilisent un accélérateur.
- Ces installations sont le plus souvent de dimension spatiale et financière importante et nécessitent une mise au point complexe et longue inhérente aux performances toujours plus poussées.
- A la lumière de ces coûts importants et d'une recherche de maîtrise du risque, la simulation comme prototypage virtuelle apparaît être une des pistes clés pour l'étude de ces machines et leur amélioration. Cette problématique est commune à tous les grands projets (aéronautique, génie civil, ...).



[<http://www.lmsintl.com/simulation/motion/landing-gear>]

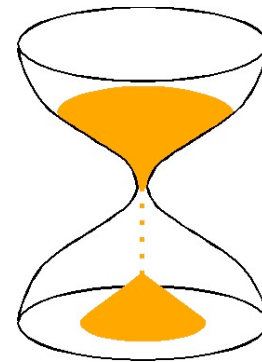
# L'algorithme

Intégration des équations du mouvement

$$\vec{F}_m \rightarrow \vec{V}'_m \rightarrow \vec{X}_m$$

Interpolation de la force

$$(\vec{E}_m, \vec{B}_m) \rightarrow \vec{F}_m$$



Dépôt des courants et charges dans des grilles

$$(\vec{X}_m, \vec{V}_m) \rightarrow (\rho_m, \vec{J}_m)$$

Calcul des champs

$$(\rho, \vec{J}) \rightarrow (\vec{E}, \vec{B})$$

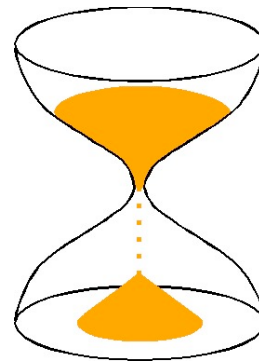
# L'algorithme

Intégration des équations du mouvement

$$\vec{F}_m \rightarrow \vec{V}'_m \rightarrow \vec{X}_m$$

Interpolation de la force

$$(\vec{E}_m, \vec{B}_m) \rightarrow \vec{F}_m$$



Dépôt des courants et charges dans des grilles

$$(\vec{X}_m, \vec{V}_m) \rightarrow (\rho_m, \vec{J}_m)$$

Calcul des champs

$$(\rho, \vec{J}) \rightarrow (\vec{E}, \vec{B})$$



# L'algorithme

Intégration des équations du mouvement

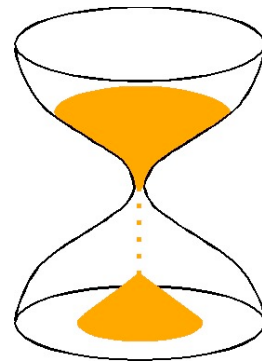
$$\vec{F}_m \rightarrow \vec{V}'_m \rightarrow \vec{X}_m$$

Collisions

$$\vec{V}'_m \rightarrow \vec{V}_m$$

Interpolation de la force

$$(\vec{E}_m, \vec{B}_m) \rightarrow \vec{F}_m$$



Dépôt des courants et charges dans des grilles

$$(\vec{X}_m, \vec{V}_m) \rightarrow (\rho_m, \vec{J}_m)$$

Calcul des champs

$$(\rho, \vec{J}) \rightarrow (\vec{E}, \vec{B})$$

# La résolution des équations de Maxwell en fréquentiel

- En considérant les deux équations qui lient la variation temporelle d'une composante au rotationnel de l'autre et en les transposant dans le domaine fréquentiel:

$$\begin{array}{l} \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B} \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu\epsilon\partial_t \vec{E} \end{array} \quad \longrightarrow \quad \begin{array}{l} \vec{\nabla} \times \vec{E} = -j\omega \vec{B} \\ \vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu\epsilon j\omega \vec{E} \end{array}$$

- En combinant les deux afin de n'isoler que le champ électrique (ou magnétique), on obtient l'équation d'onde avec  $k = \omega/c$  :

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E} - k^2 \vec{E} = 0$$

- Cette équation peut être résolue par différences finies en minimisant un résidu ou bien par éléments finis à l'aide d'une base de fonctions comme celle proposée par Nedelec en 1980. Il convient alors de trouver les valeurs propres d'un système matriciel:

$$\vec{E} = \sum_i x_i \vec{N}_i \quad \text{avec} \quad K_{ij} = \frac{1}{\mu} \vec{\nabla} \times \vec{N}_i \cdot \vec{\nabla} \times \vec{N}_j$$
$$K \cdot \vec{x} = k^2 M \cdot \vec{x} \quad M_{ij} = \vec{N}_i \cdot \vec{N}_j$$

# La résolution des équations de Maxwell en temporel

- Depuis les années 60, l'algorithme de Yee reste la façon la plus simple et la plus intuitive de calculer Maxwell en temporel:

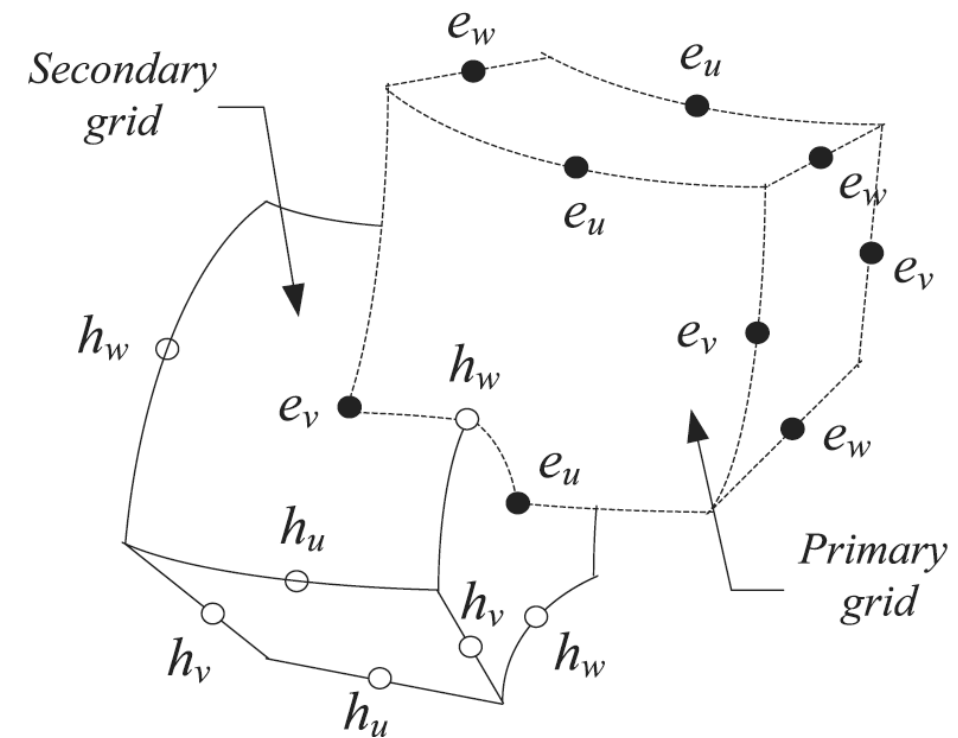
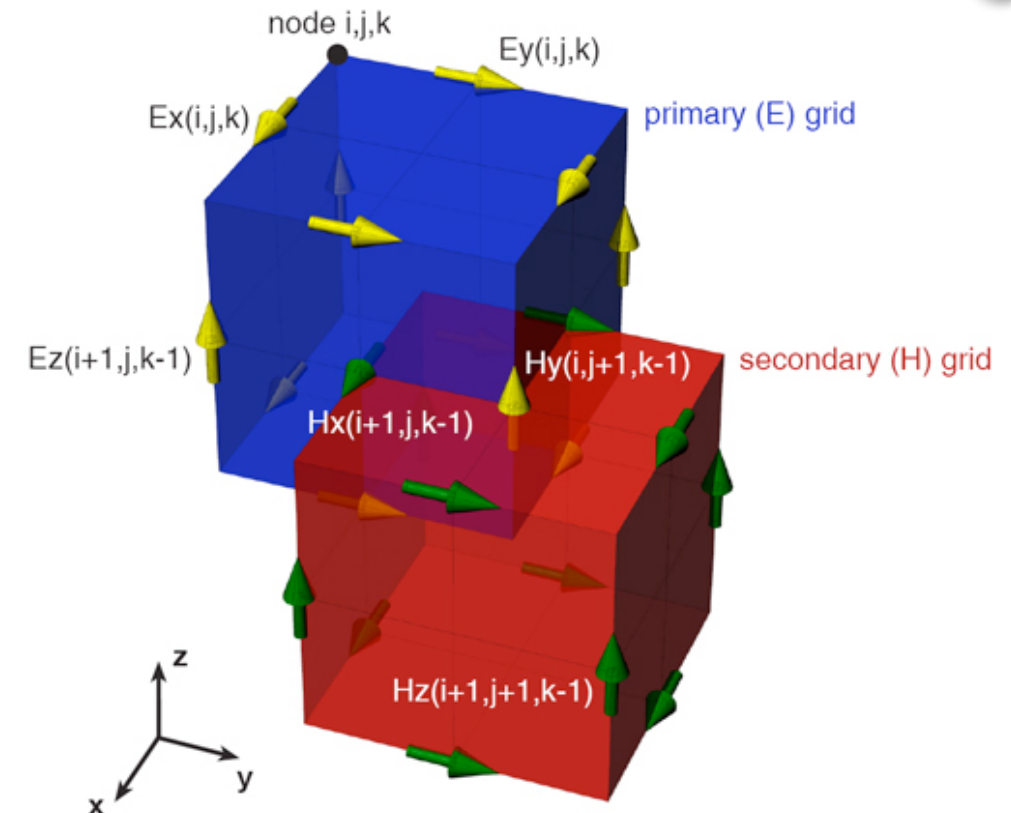
$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left[ \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right]$$



$$E_x |_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} = E_x |_{i,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\epsilon_{i,j+1/2,k+1/2}} \cdot$$

$$\left[ \frac{H_z |_{i,j+1,k+1/2}^n - H_z |_{i,j,k+1/2}^n}{\Delta y} - \frac{H_y |_{i,j+1/2,k+1}^n - H_y |_{i,j+1/2,k}^n}{\Delta z} \right]$$

- Depuis d'autres formulations en éléments finis ou volumes finis ont été développées.
- Toutes ces méthodes peuvent s'appuyer sur des **grilles à géométrie structurée ou non, orthogonale ou non, courbée ou non, et avec raffinement adaptatif ou non.**



# Les processus collisionnels atomiques

- Une technique de type Monte Carlo développé par Berkeley est souvent utilisé pour rendre compte de nombreuses collisions:
  - électrons-neutres (diffusion élastique, excitations et ionisations),
  - ions-neutres (diffusion, échange de charge),
  - électrons-ions (attachement pour les faibles distances).
- Le principe s'appuie sur une approche probabiliste, on calcule d'abord une fréquence de collisions totale:

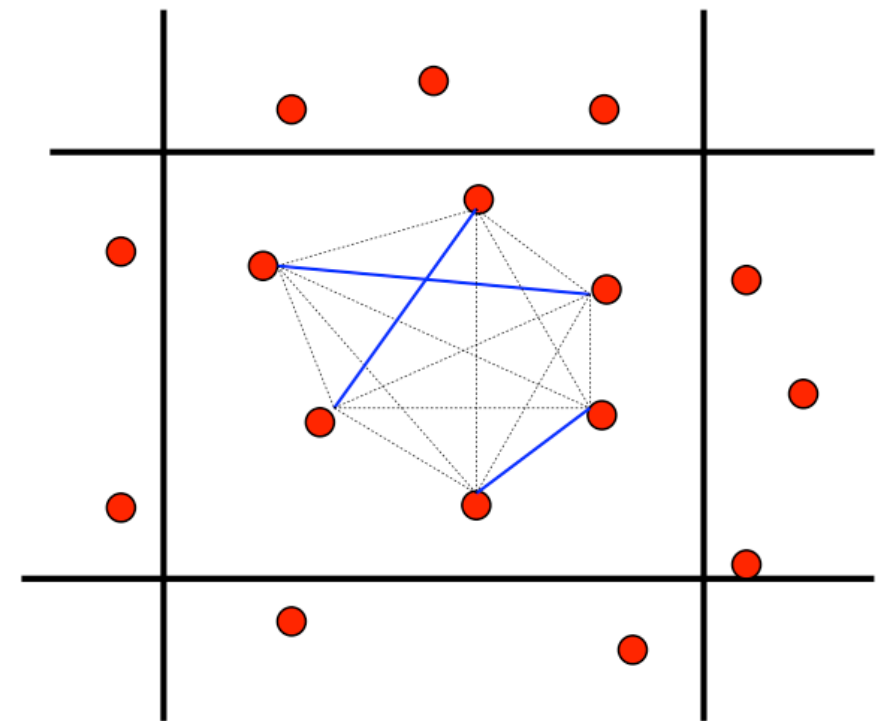
$$\nu_{tot} = \sum_{i=1}^{N_{coll}} n_{cible,i} \cdot \sigma_i(E_m) \cdot v_m$$

- Puis une probabilité de collisions:  $P_{coll} = 1 - \exp(-\nu_{tot}\delta t)$
- Elle est comparée à un nombre aléatoire  $\Gamma \in [0,1]$  pour statuer sur l'occurrence d'une collision.
- Un nouveau nombre  $\Gamma$  est tiré et est comparé aux fréquences relatives  $v_1/\nu_{tot}$ ,  $(v_1+v_2)/\nu_{tot}$ , ... pour sélectionner le type de collision.
- Le vecteur vitesse ou l'état de charge des particules considérées est éventuellement modifié. D'autres particules peuvent être créées.

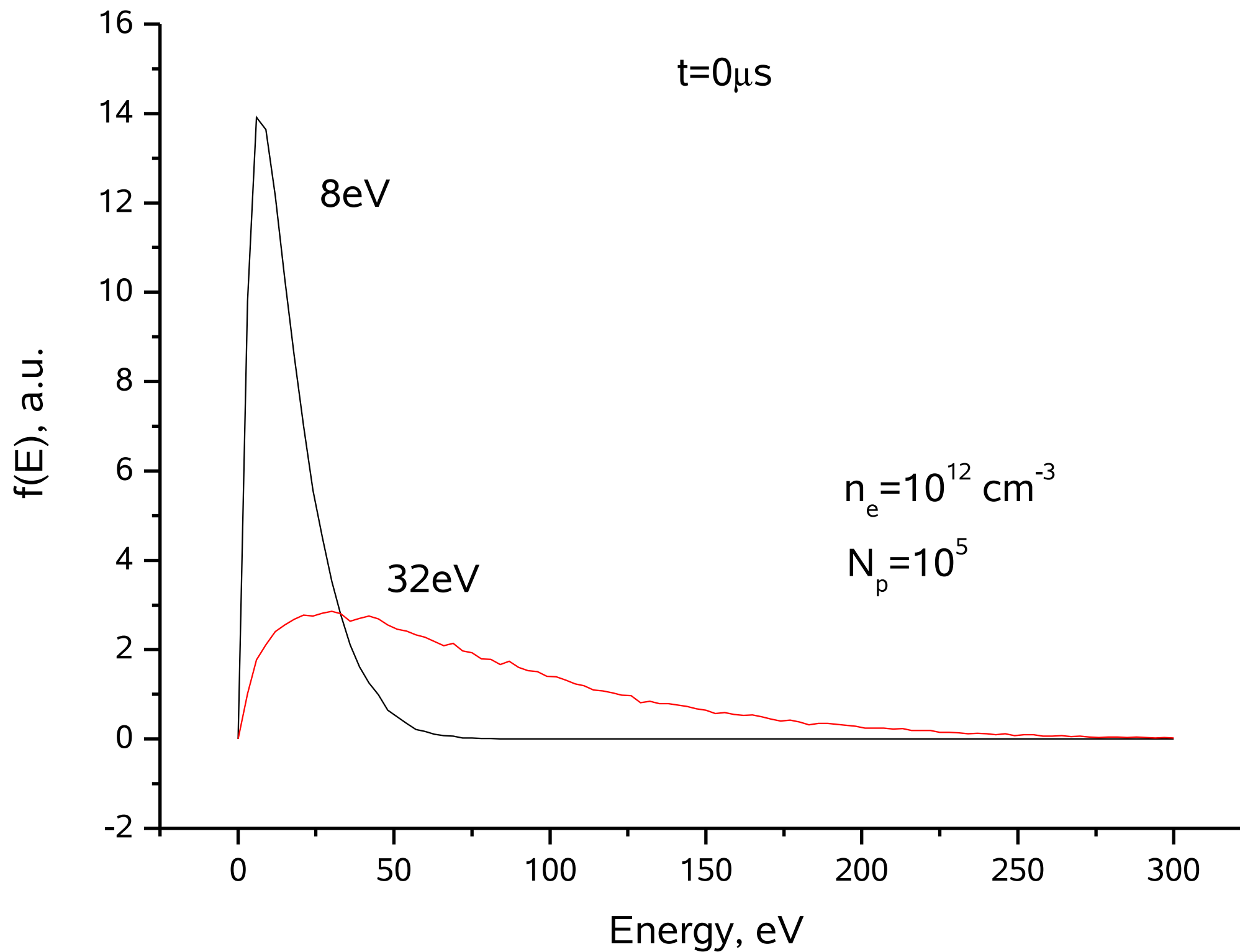


# La diffusion coulombienne

- Une technique intuitive consiste à appliquer la force de Coulomb. Elle devient rédhibitoire lorsque le nombre de particules est grand ( $N^2$  opérations).
- Une technique plus séduisante repose sur une prise en compte de la force coulombienne en la représentant de deux manières [Dawson, Ruhl] :
  - une composante à longue portée calculée par une méthode quasi-statique (Poisson) ou complètement dynamique (FDTD),
  - une composante à courte portée évaluée par une méthode de type Monte Carlo via des collisions binaires “témoins”.
- L'évaluation s'appuie sur un préclassement géographique des particules à l'aide d'une grille.
- Pour une particule donnée, cette grille renseigne sur la proximité de voisines et un tirage sur celles-ci permet de sélectionner quelques paires représentatives dont l'interaction Coulombienne est calculée.

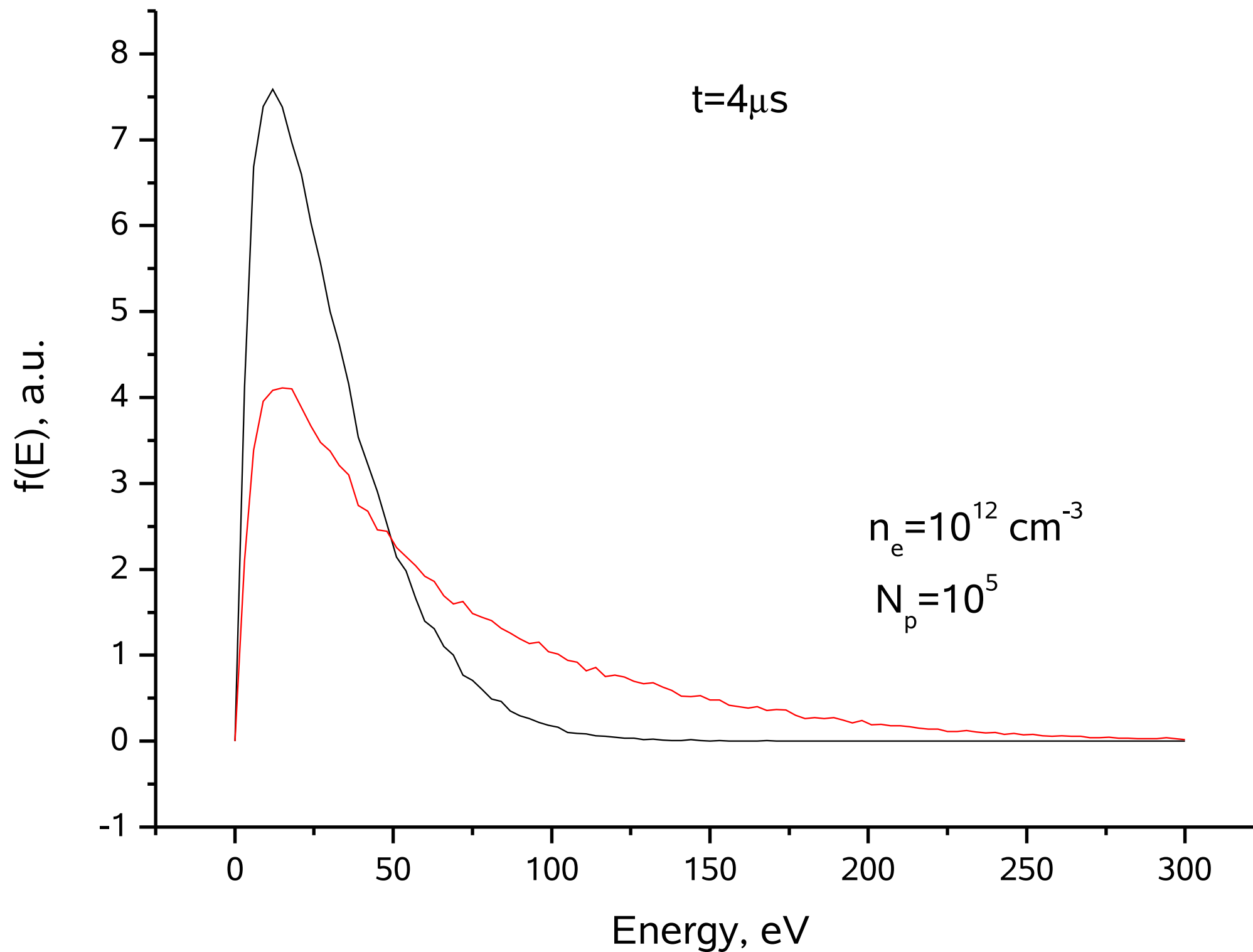


# Exemple d'application



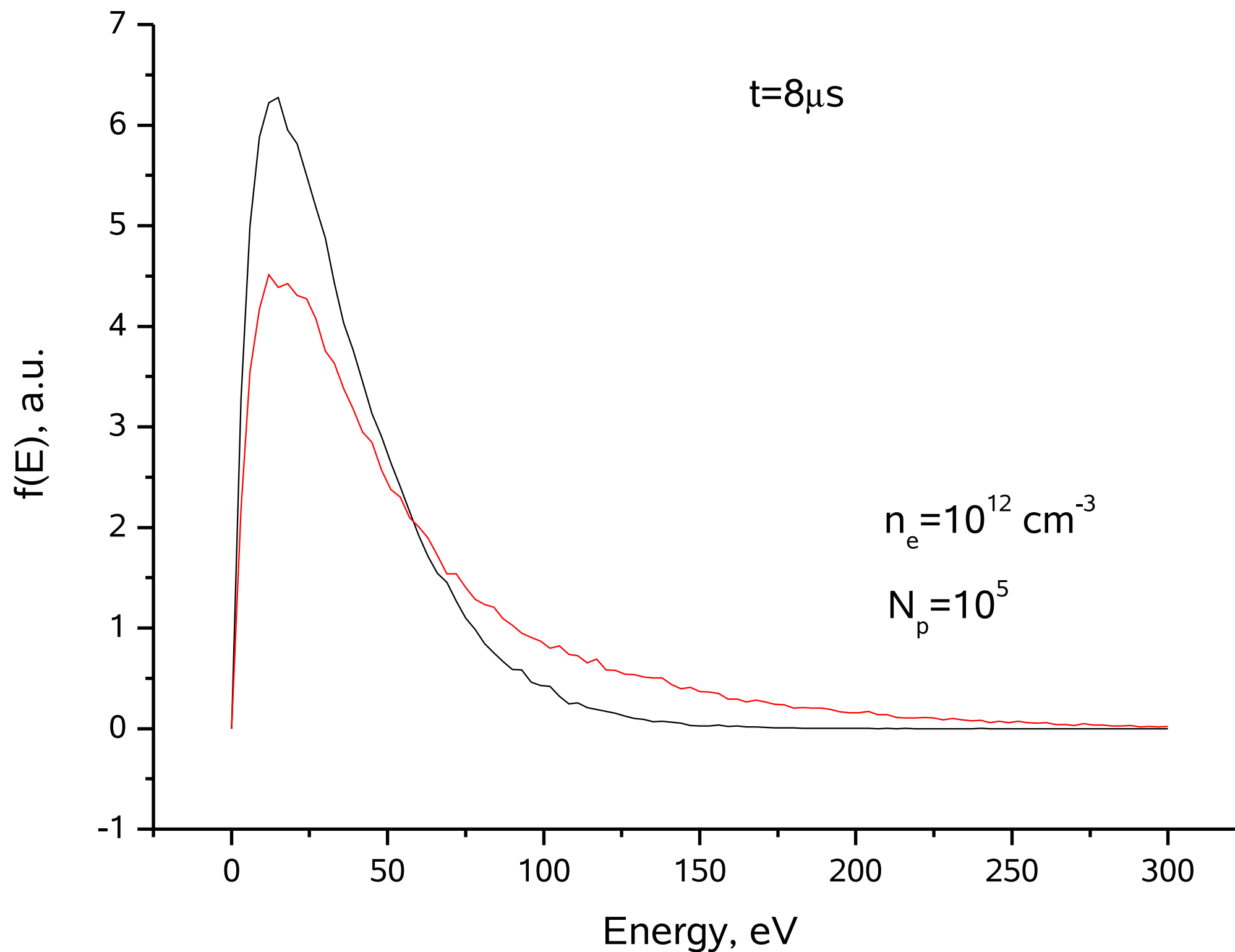
# Exemple d'application

Irfu  
CEA  
saclay



# Exemple d'application

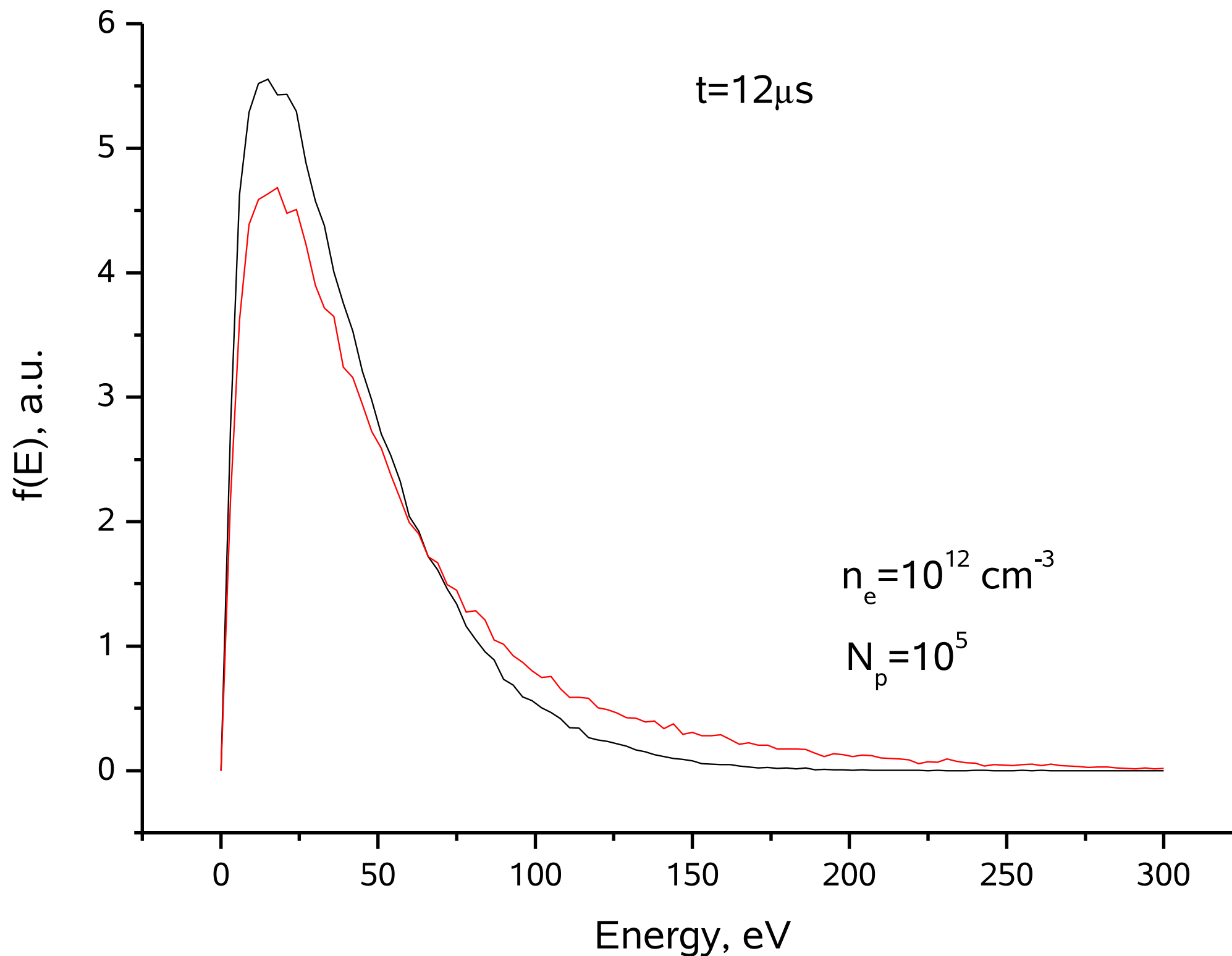
Irfu  
CEA  
saclay





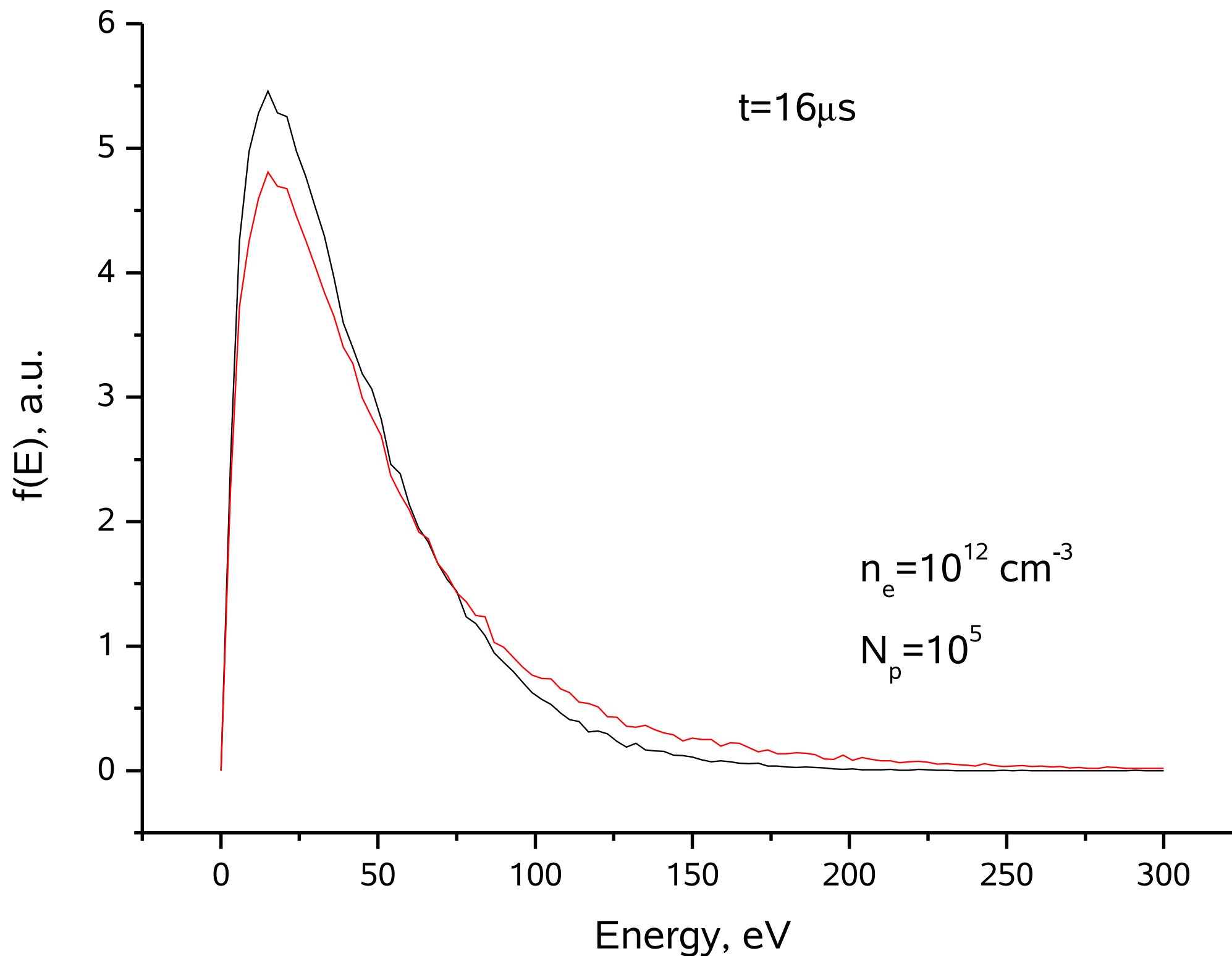
# Exemple d'application

Irfu  
CEA  
saclay

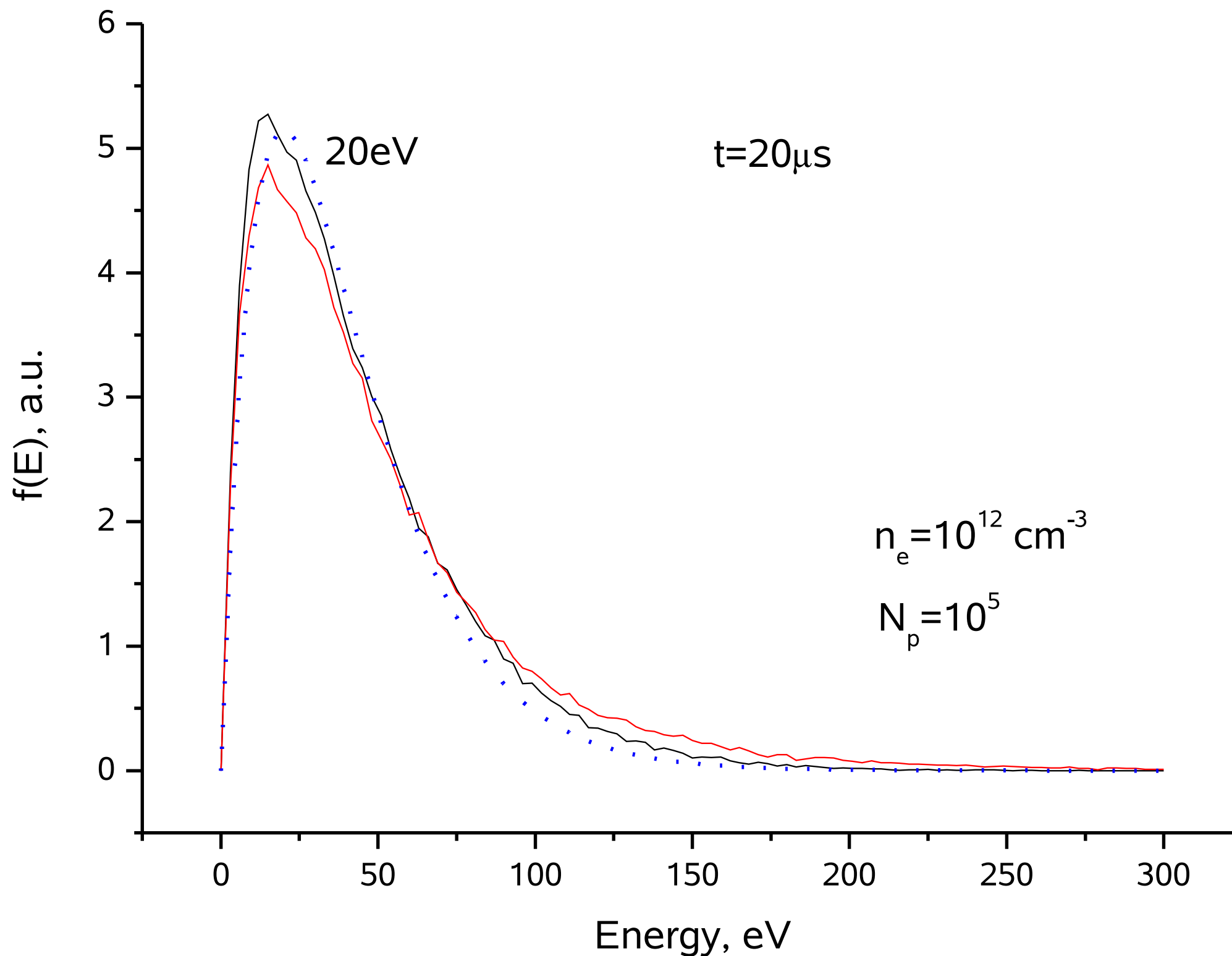


# Exemple d'application

Irfu  
CEA  
saclay



# Exemple d'application



# L'émission secondaire

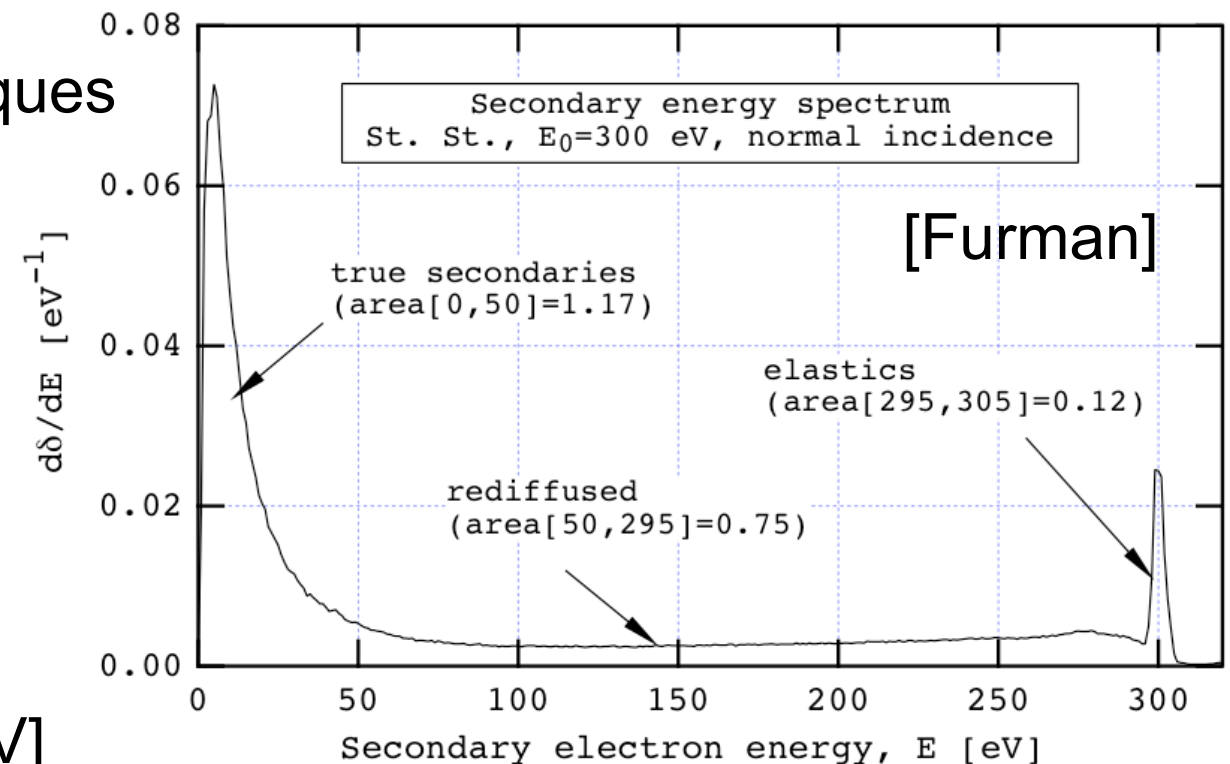
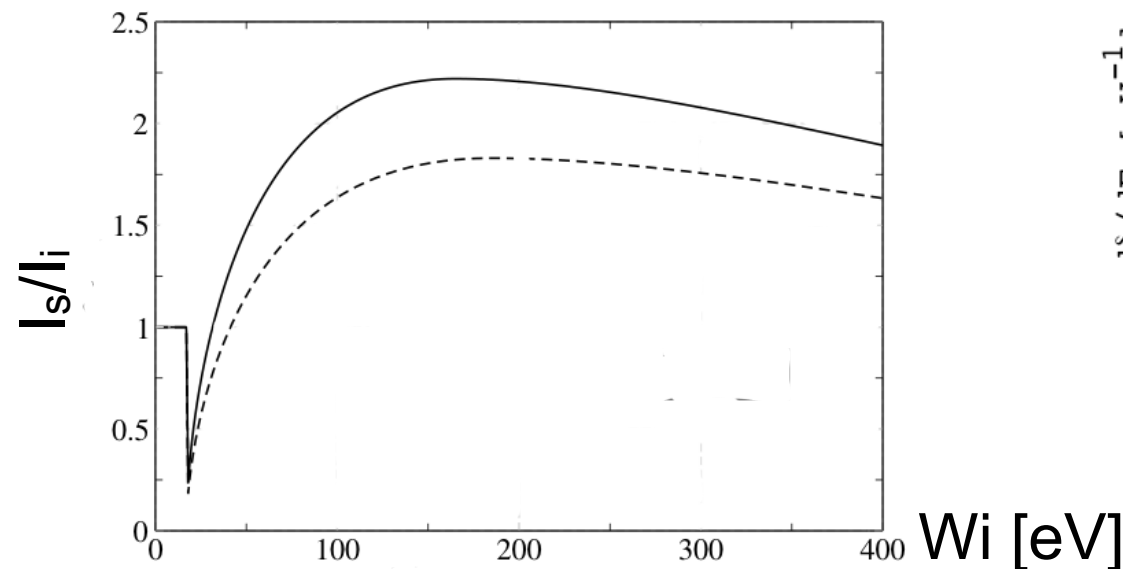
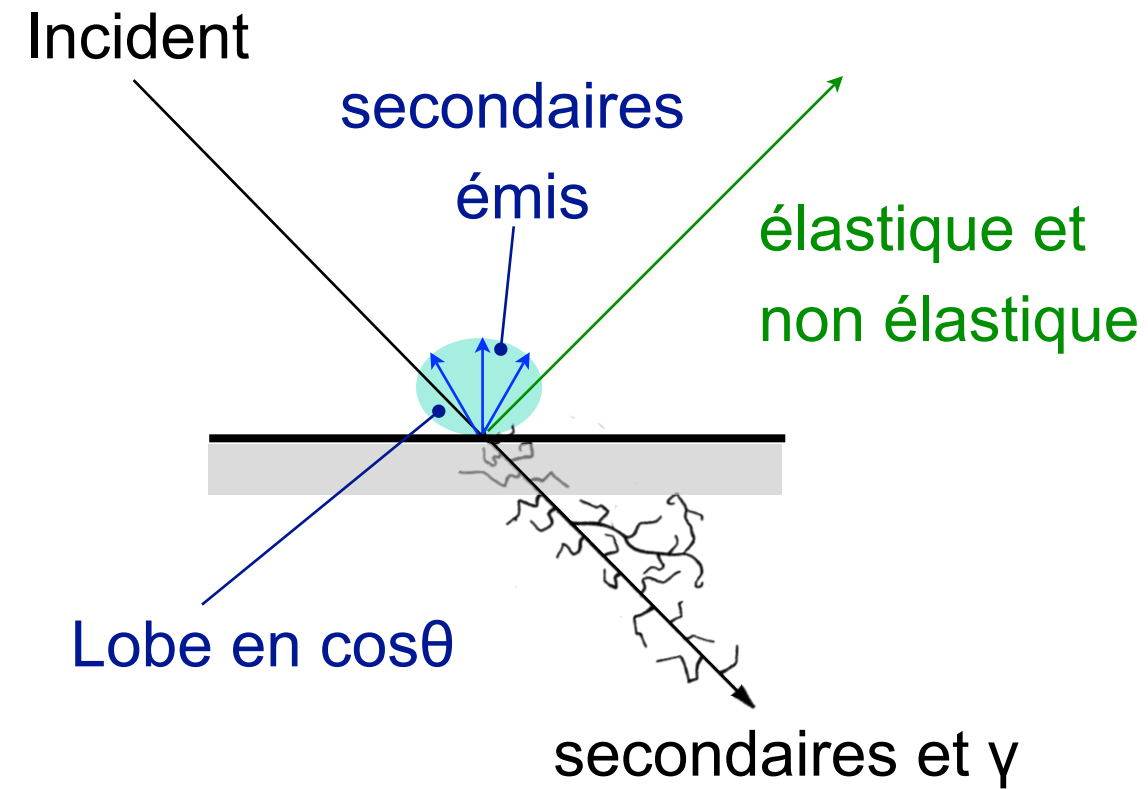
- L'impact d'un ion ou d'un électron dans un solide induit une gerbe de photons et d'électrons.

- Si les électrons sont assez près de la surface, ceux-ci peuvent s'échapper.

- Plus l'incidence est rasante, plus le phénomène est amplifié ( $1/\cos\theta$ ).

- La plus grande partie des électrons émis ont moins de 50 eV. Quelques % résultent de collisions élastiques ou non.

- Lorsque les incidents n'ont que quelques eV, le solide les réfléchit.



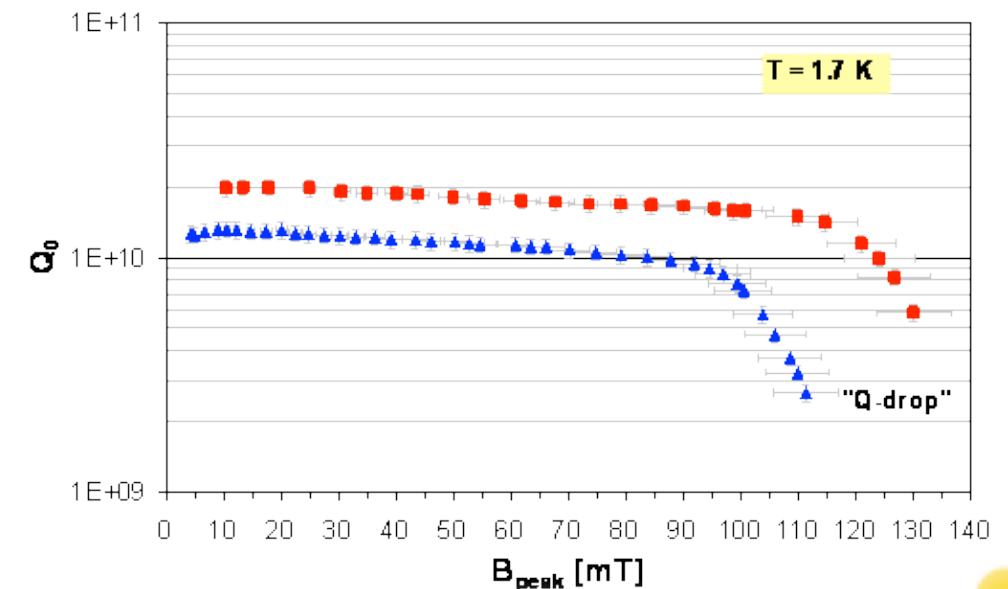
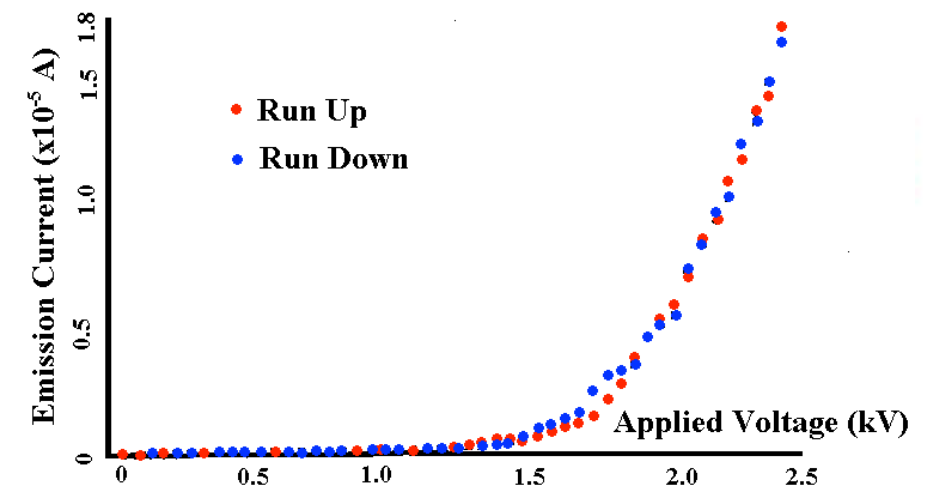
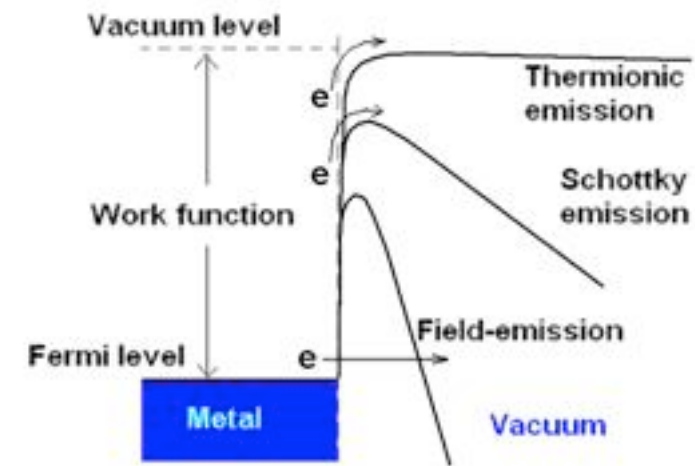
# L'émission de champ

- Cette émission par effet tunnel est un des premiers de la physique quantique à la fin de années 20 [Fowler-Nordheim, wikipedia]:

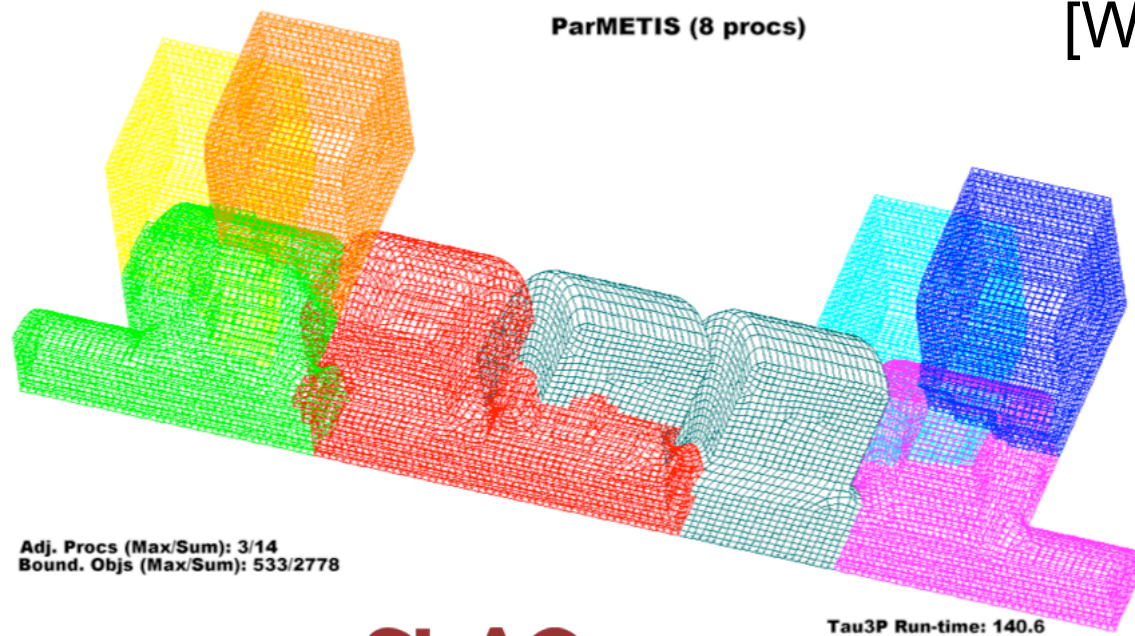
$$J = a\phi^{-1}F^2 \exp[-v(f) b\phi^{3/2}/F], \dots\dots\dots(30a)$$

$F \equiv \text{chp élec.}$

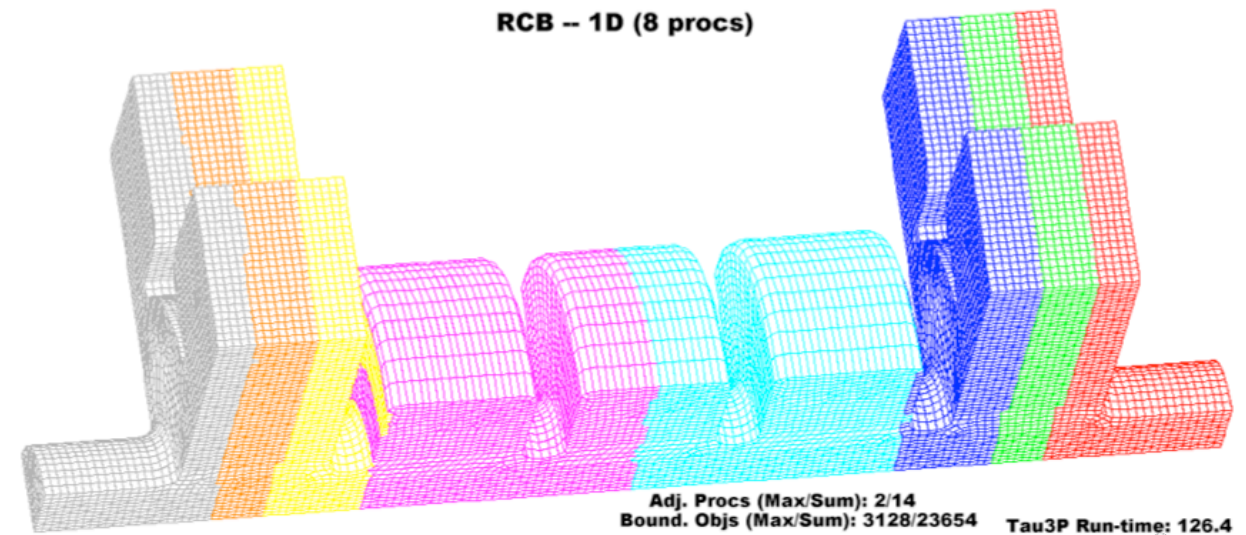
- Ce phénomène peut être un facteur limitant pour les cavités supraconductrices.
- Il est également une source de courant d'obscurité pour les accélérateurs à électrons.
- Sa modélisation passe essentiellement par une très bonne évaluation du champ électrique de surface.
- Outre une bonne représentation de la courbure de la surface par un maillage conforme, une technique efficace consiste à extrapoler judicieusement à la surface les valeurs internes ou bien à doubler le calcul dynamique par un calcul statique dédié.



# Les stratégies de parallélisation



[Wolf]



	Nbre total de procs	Tau3P tps de calcul	Nbre max. de procs adjacents	Somme des procs adjacents	Nbre max. d'objets en commun	Somme des objets en commun
Parmetis	8	288,5	3	14	585	2909
RCB 1D(z)		218,5	2	14	3128	14363
Parmetis	32	165,5	8	134	731	16405
RCB 1D(z)		<b>67,7</b>	<b>2</b>	66	2683	63510



# Les effets faisceau-faisceau

Effet de pincement

I r f u

cea

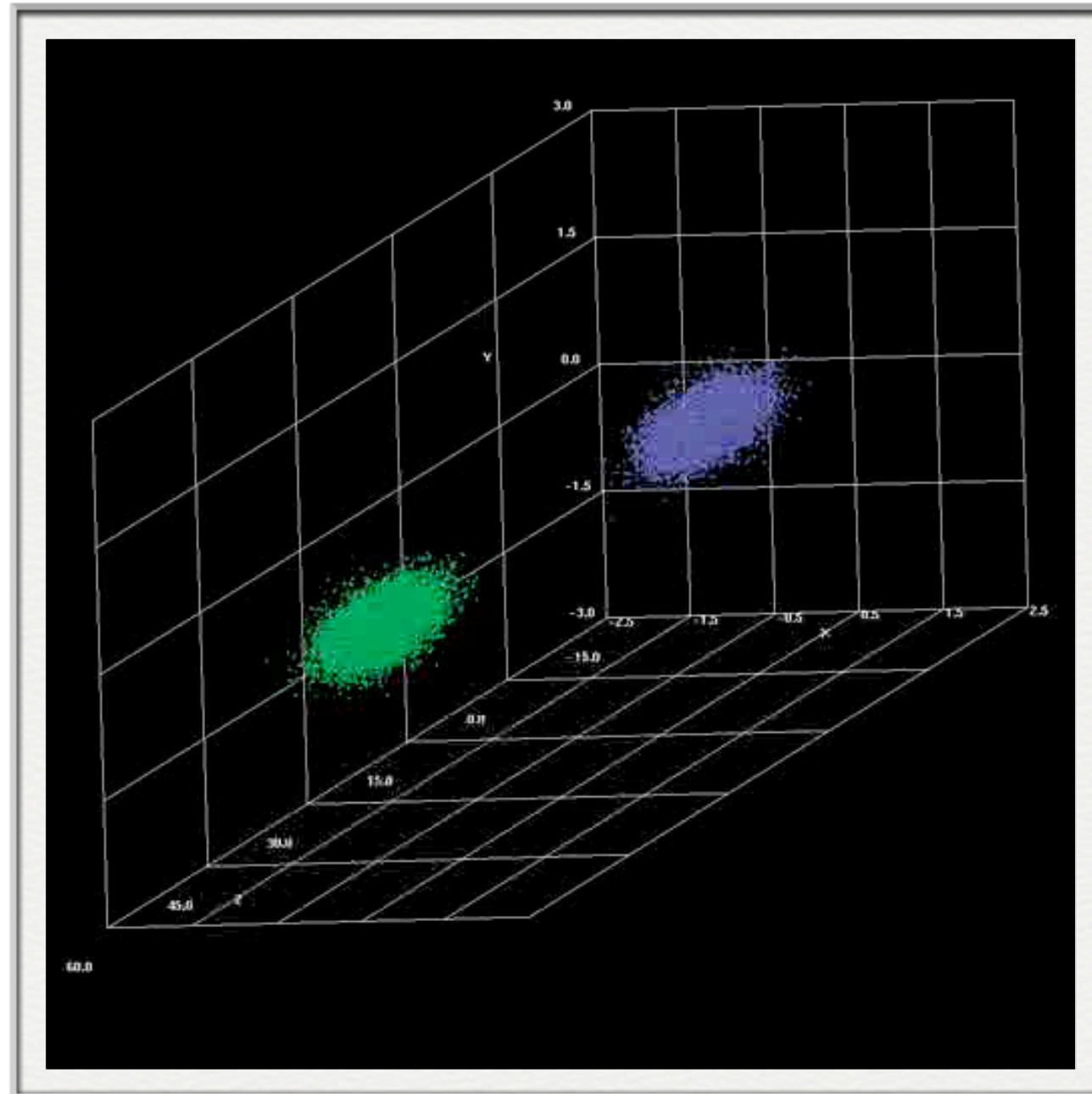
saclay

[Adelman,PSI]

# Les effets faisceau-faisceau

## Effet de pincement

I r f u  
cea  
saclay



[Adelman,PSI]

# Le courant d'obscurité dans une cavité accélératrice

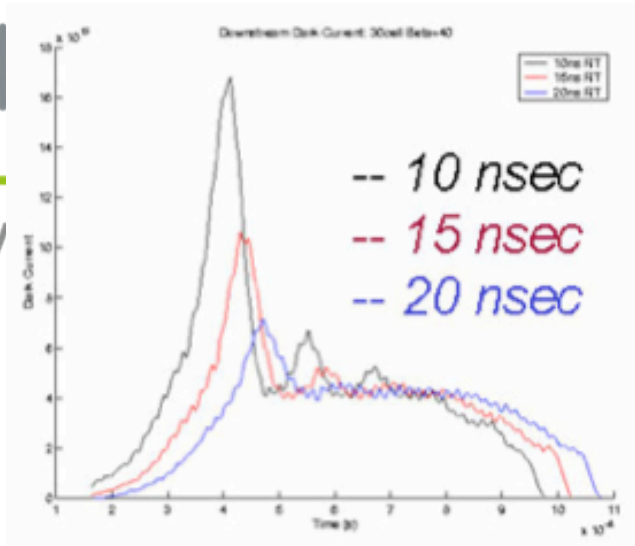


Minimisation du contenu spectrale du pulse RF



I r f u

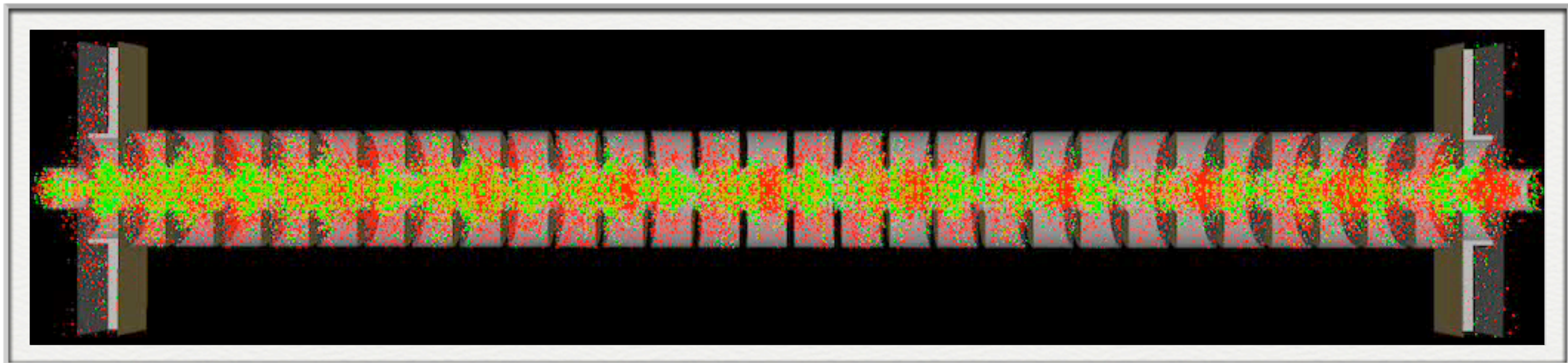
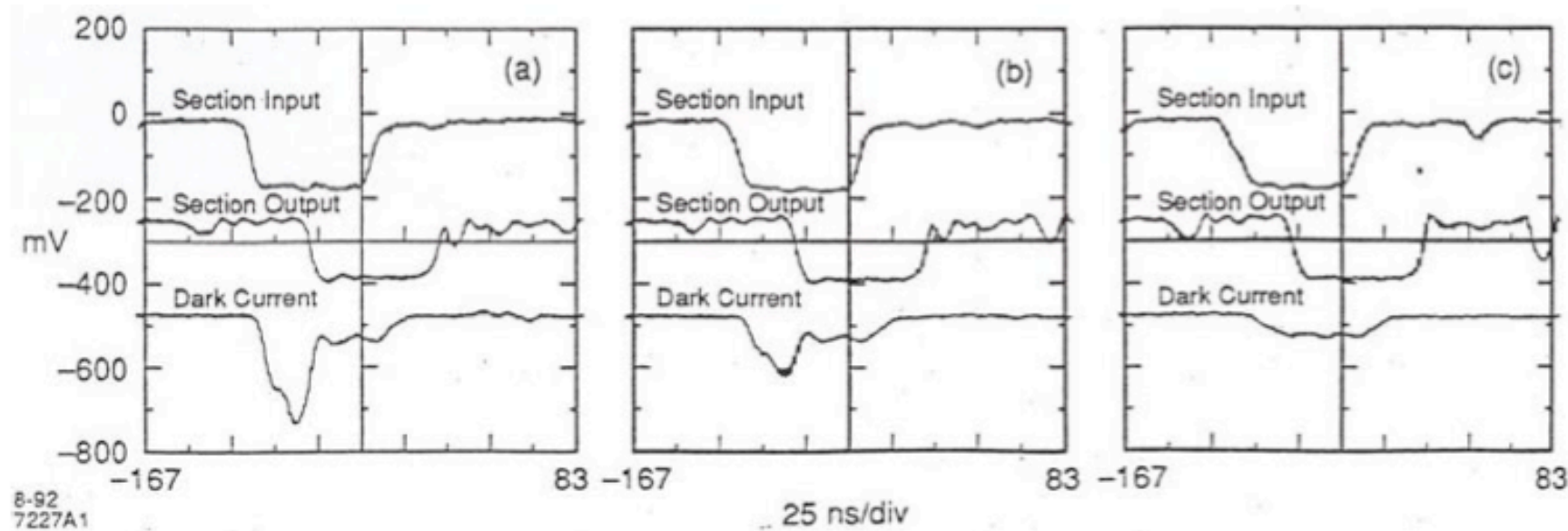
cea  
saclay



10 ns

15 ns

20 ns



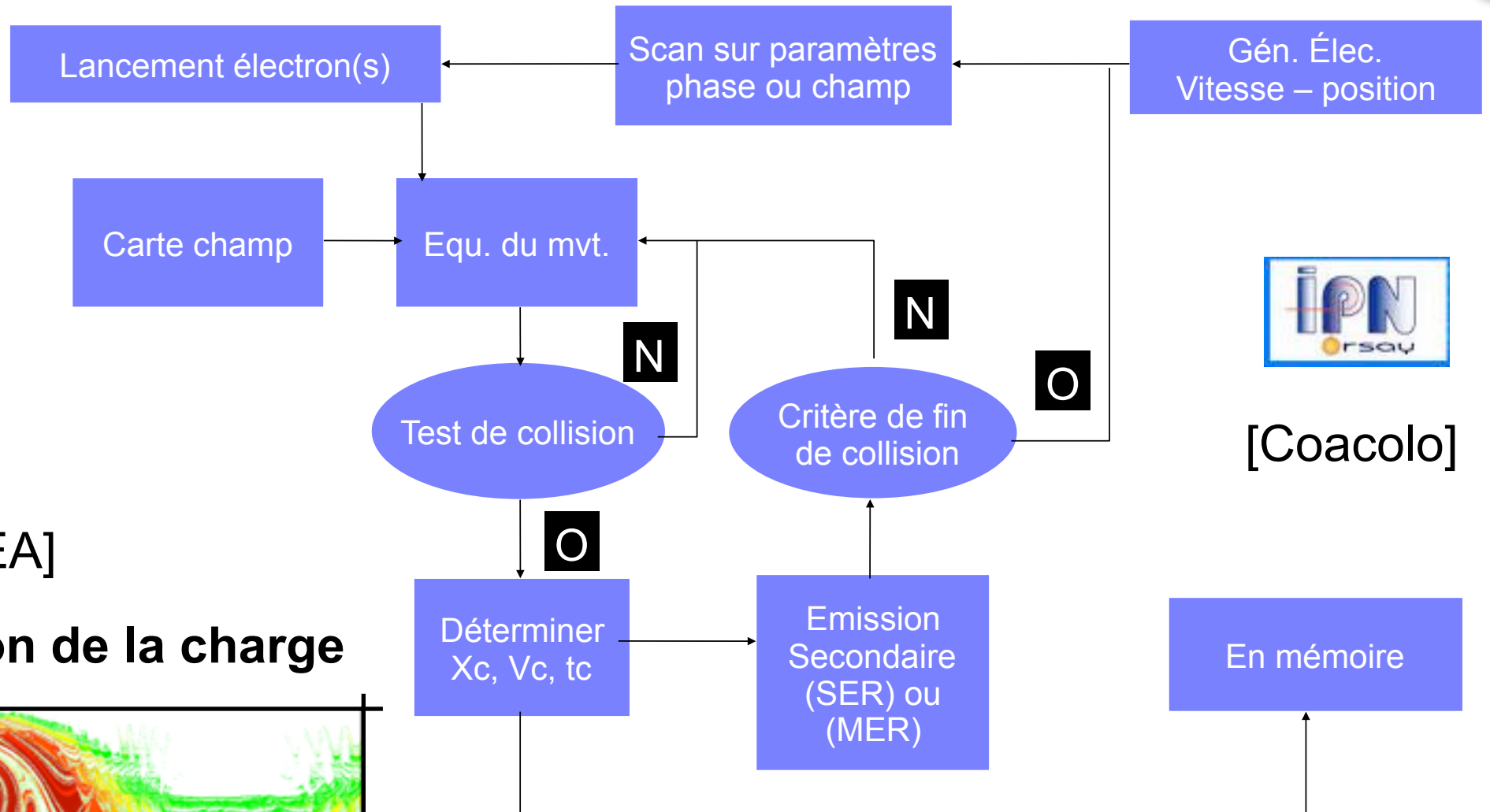
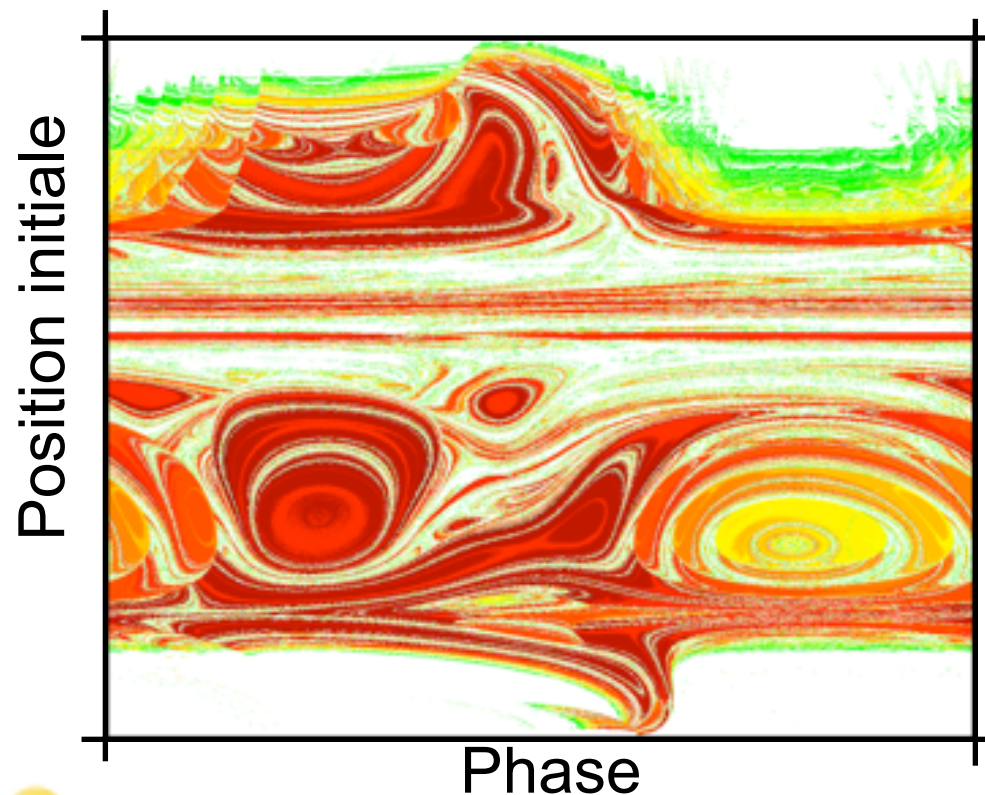
# Le multipactor dans les cavités



[Coacolo]

[Devanz, CEA]

## Multiplication de la charge



- La mise en évidence de ces résonances très ténues est assez difficile.
- Elle nécessite une bonne précision sur le champ à la surface du conducteur et une discrétisation fine du temps, de l'espace et de l'amplitude.



# L'excitation de modes d'ordre supérieur dans l'ILC



Propagation des modes



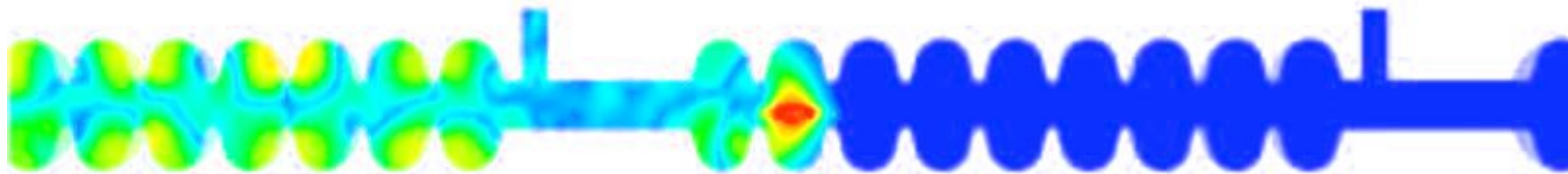
I r f u



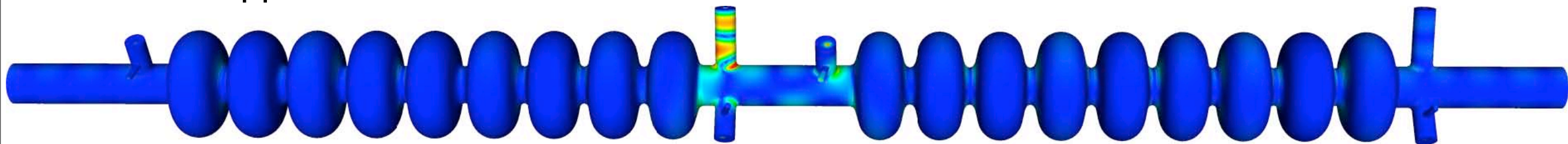
saclay



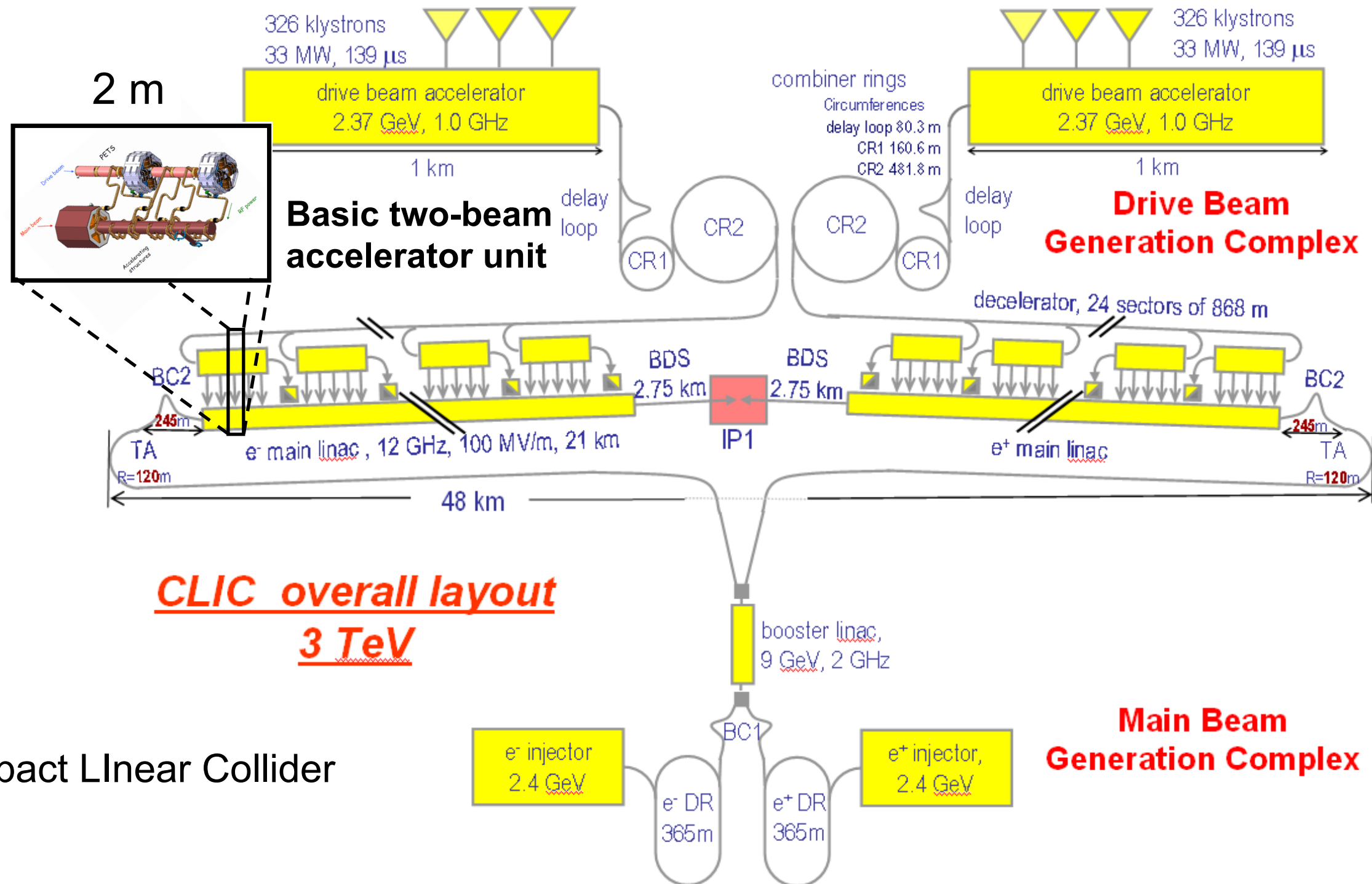
Zoom sur les coupleurs HOM



Mode trappé



# Le concept CLIC



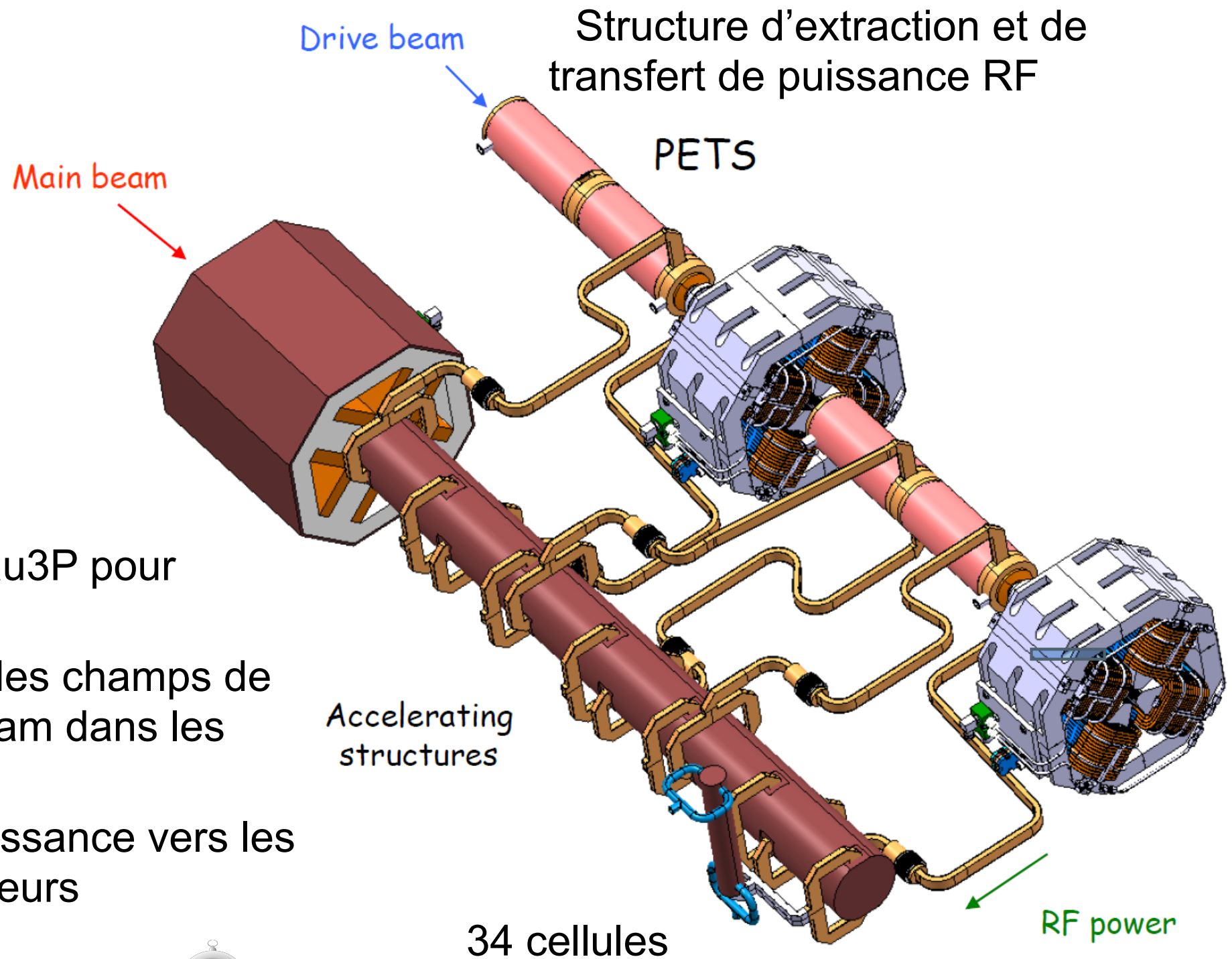
Compact Linear Collider

**Main Beam Generation Complex**

[CERN]



# Un module CLIC (2 m)

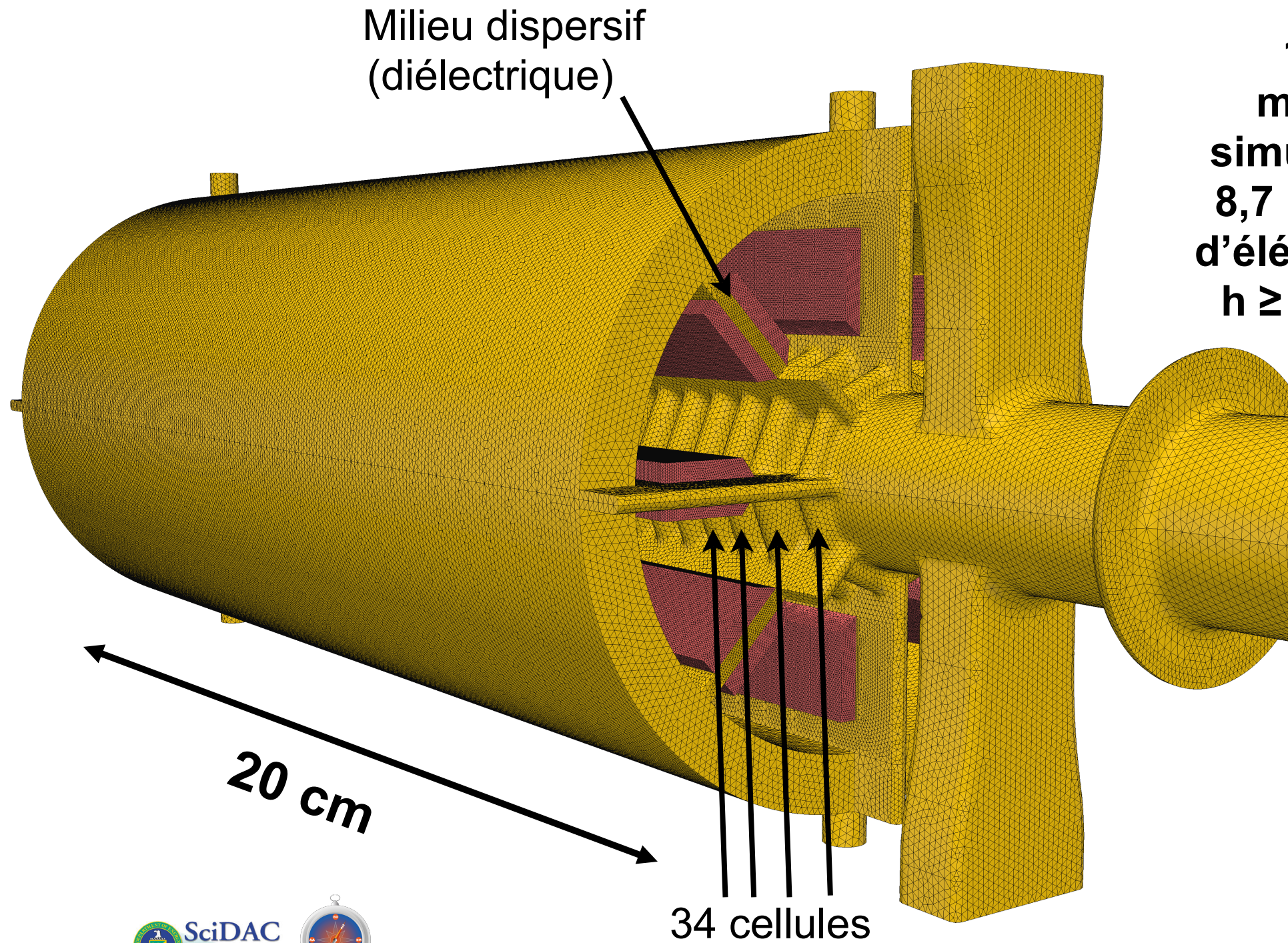


Application du code Tau3P pour étudier:

- l'amortissement des champs de sillage du drive beam dans les PETS,
- le transfert de puissance vers les modules accélérateurs



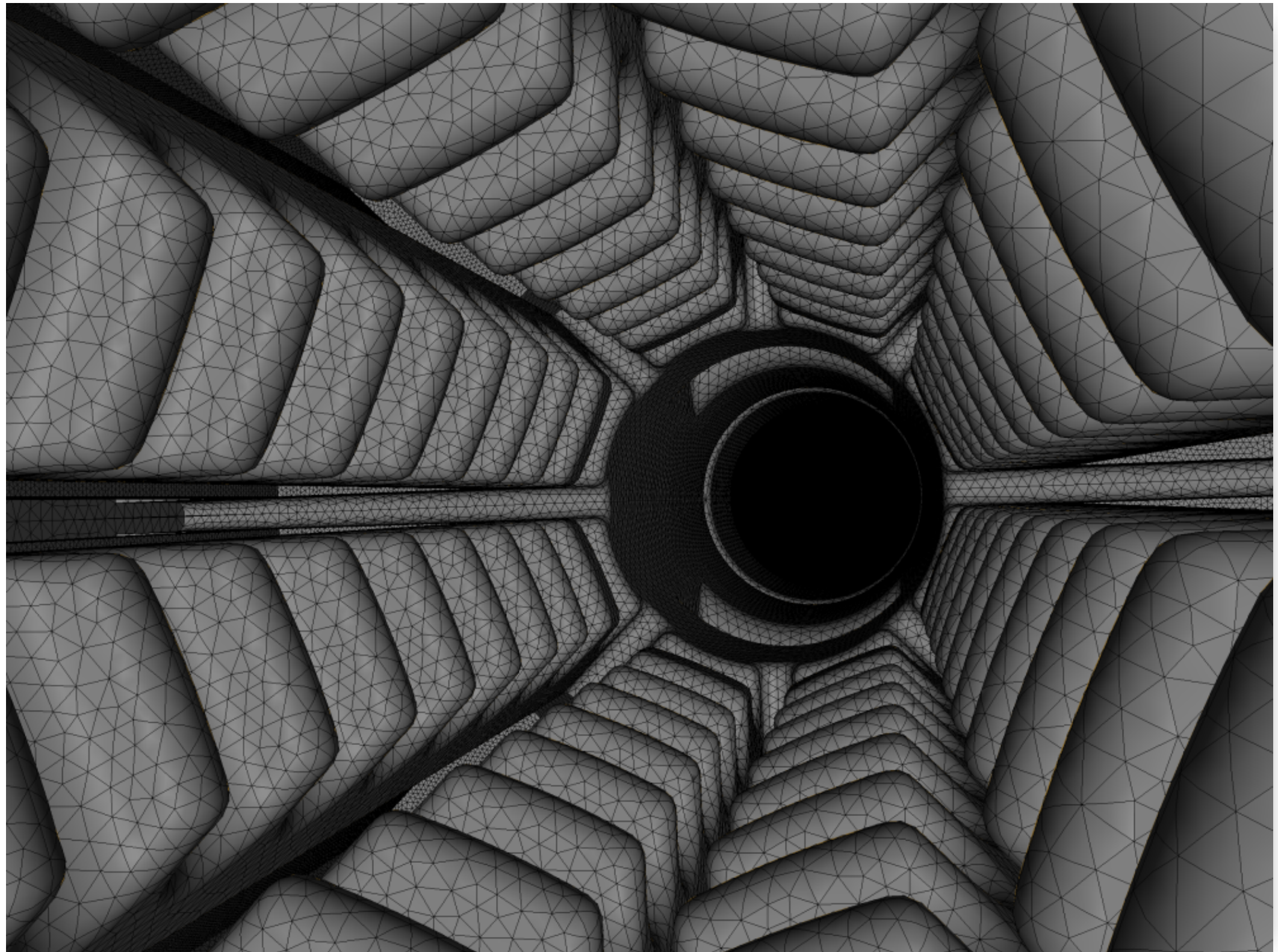
# Maillage non structuré de la structure PETS





# Vue interne - maillage à éléments courbes

I r f u  
cea  
saclay



SLAC  
NATIONAL ACCELERATOR LABORATORY



[Candel]

# Amortissement des HOM (T3P)

I r f u

cea

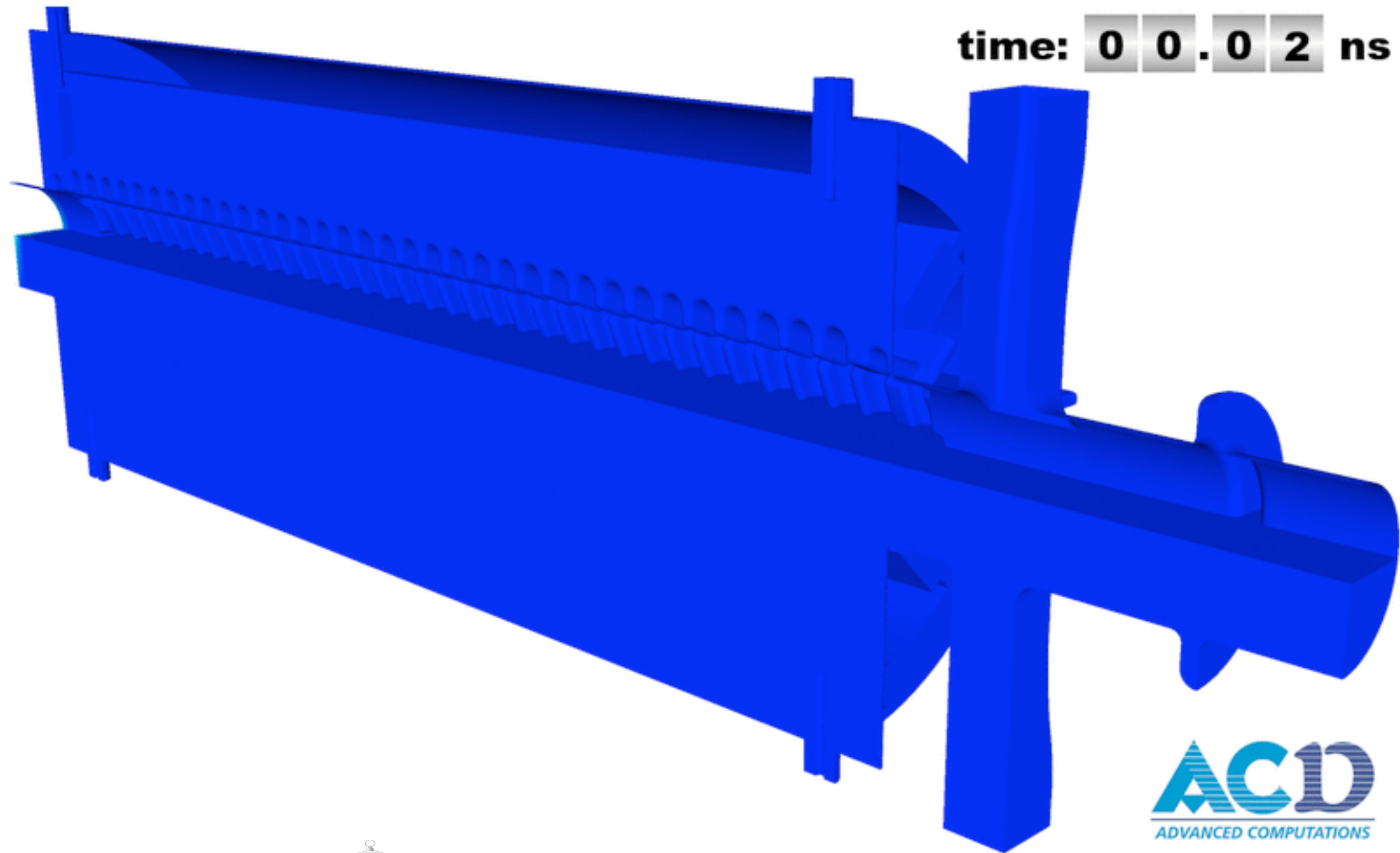
saclay



[Candel]

# Amortissement des HOM (T3P)

I r f u  
—  
cea  
—  
saclay



[Candel]

# Transfert vers le faisceau principal (T3P)

I r f u  
CEA  
saclay

**1/4 du  
modèle  
simulé avec  
17 millions  
d'éléments et  
 $h \geq 0,3$  mm**

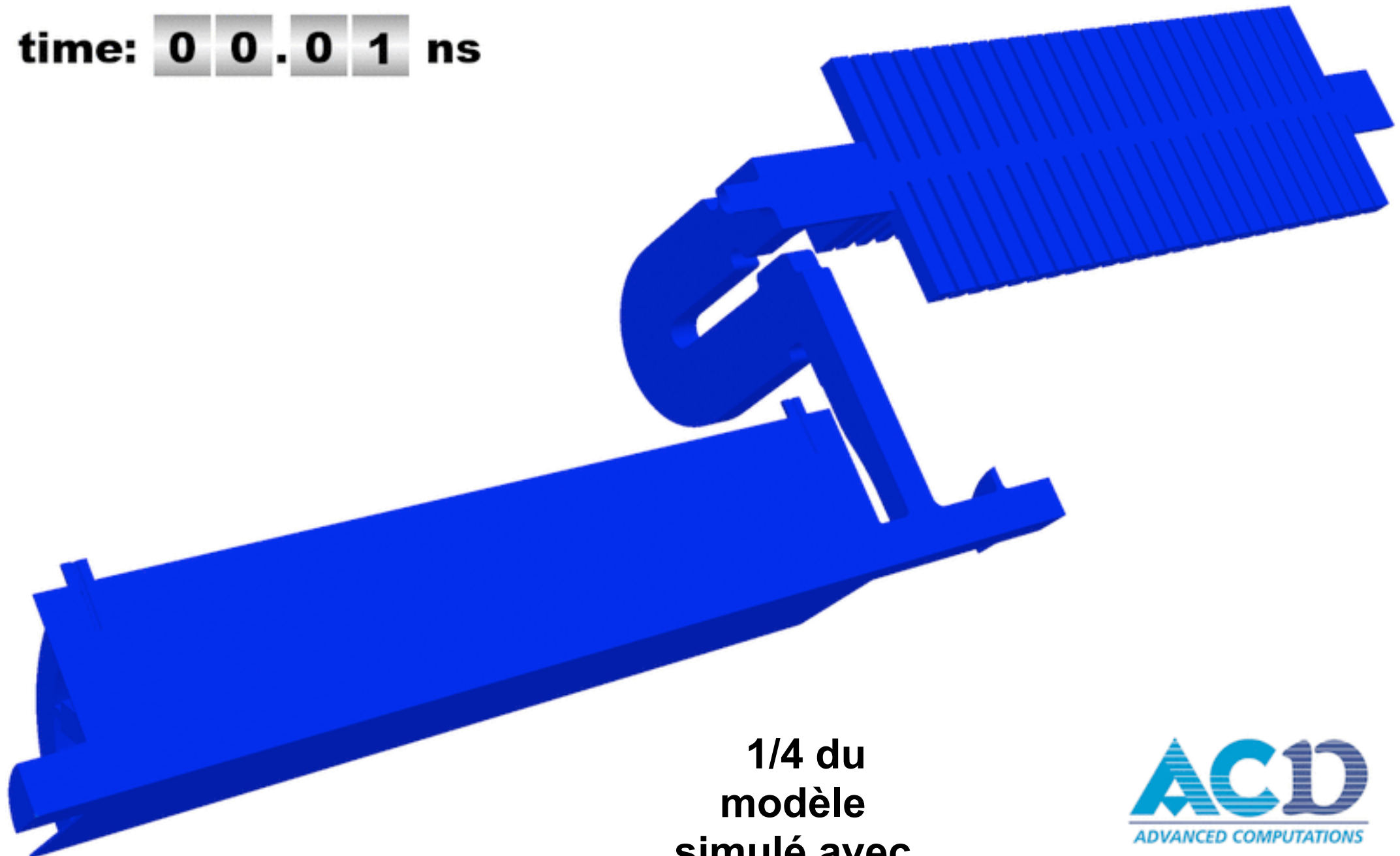
[Candel]





# Transfert vers le faisceau principal (T3P)

time: 0 0 . 0 1 ns



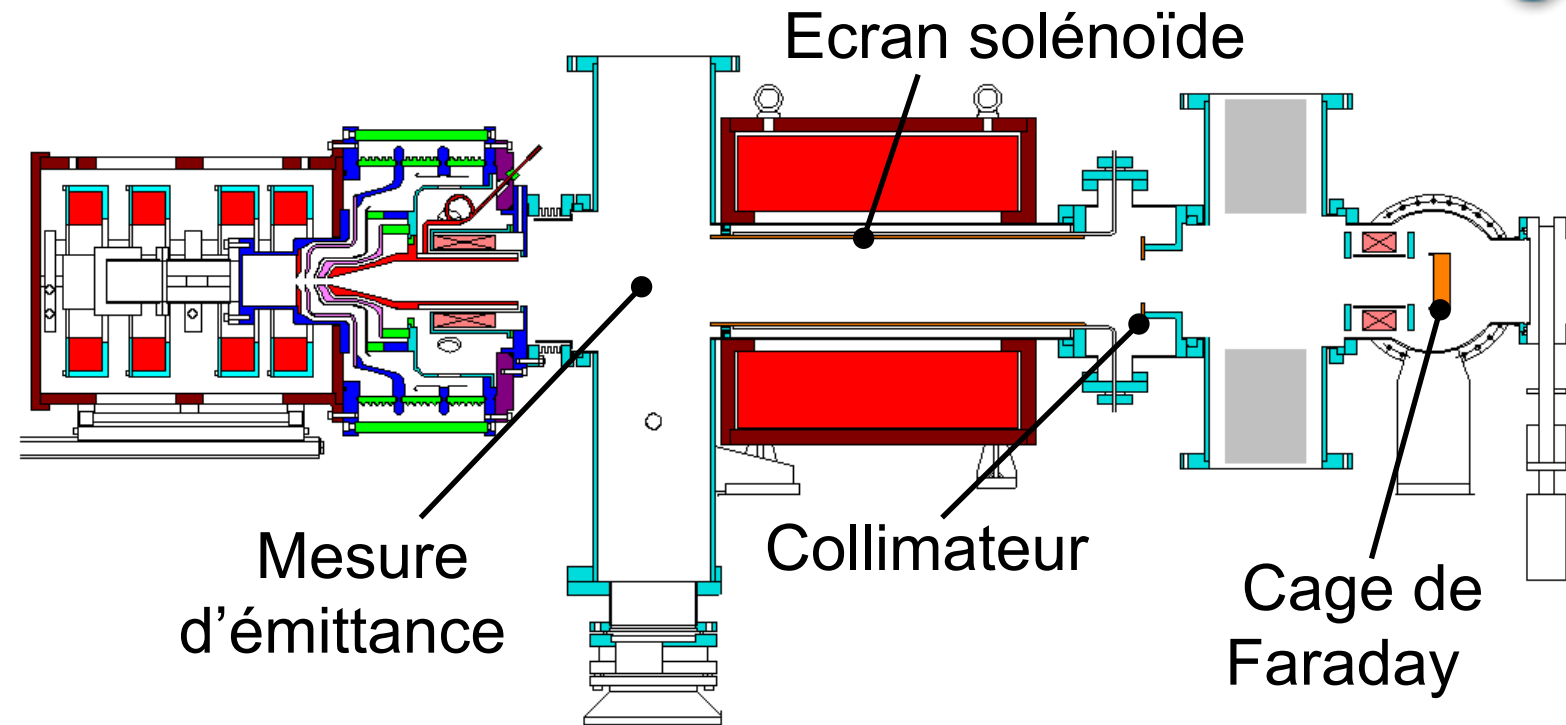
1/4 du  
modèle  
simulé avec  
17 millions  
d'éléments et  
 $h \geq 0,3$  mm



[Candel]

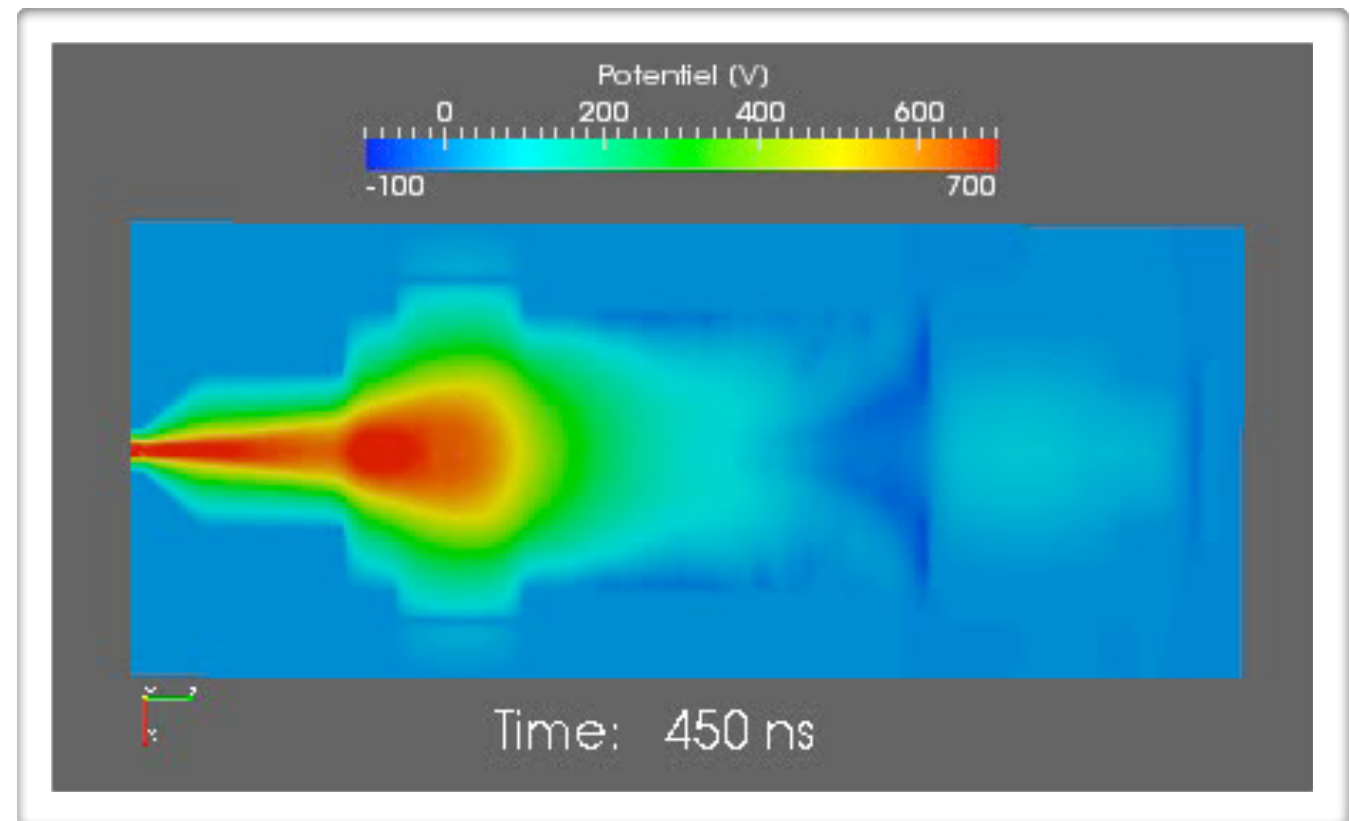
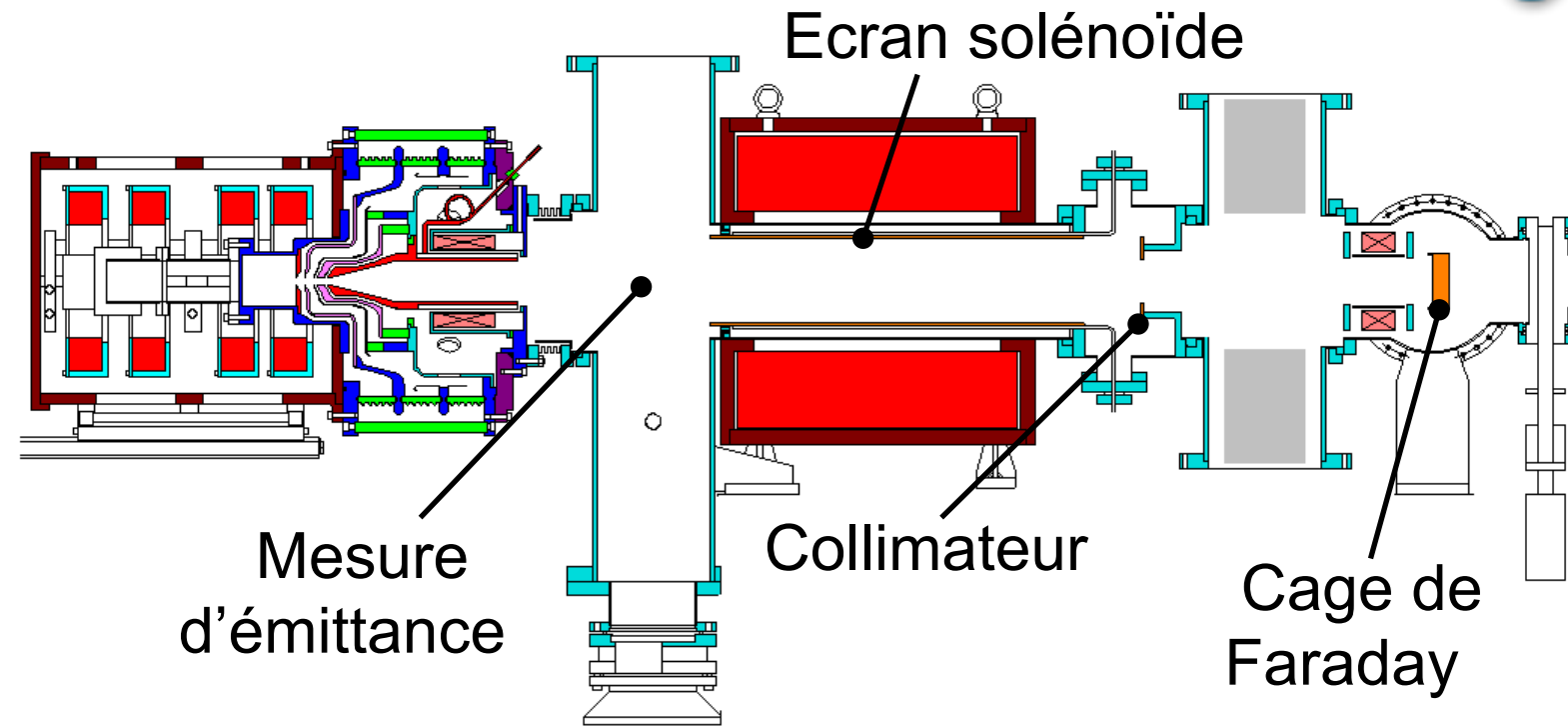
# Neutralisation de charge d'espace dans une LBE

- Ligne de transport SILHI de 100 mA de protons.
- Neutralisation de la charge d'espace par ionisation du gaz résiduel et émission secondaire.
- Le caractère transitoire est à intégrer pour les linéaires pulsés.
- L'influence de plusieurs paramètres implique une charge d'espace résiduelle significativement compensée mais très fortement non linéaire.
- La variation de la pression impacte localement l'état d'équilibre.
- Un bon accord entre SolMaxP et l'expérience.



# Neutralisation de charge d'espace dans une LBE

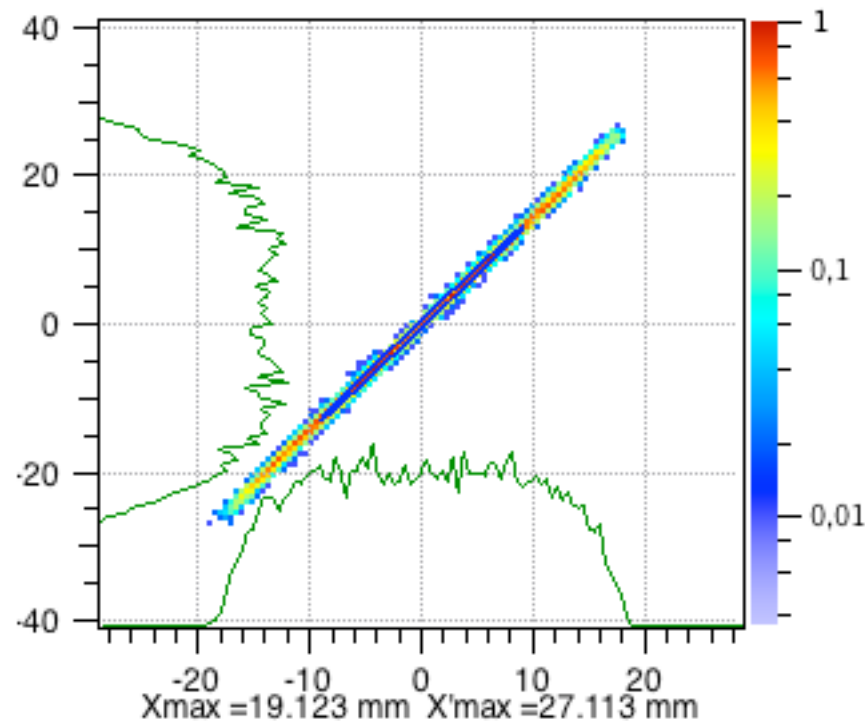
- Ligne de transport SILHI de 100 mA de protons.
- Neutralisation de la charge d'espace par ionisation du gaz résiduel et émission secondaire.
- Le caractère transitoire est à intégrer pour les linéaires pulsés.
- L'influence de plusieurs paramètres implique une charge d'espace résiduelle significativement compensée mais très fortement non linéaire.
- La variation de la pression impacte localement l'état d'équilibre.
- Un bon accord entre SolMaxP et l'expérience.



# Neutralisation de charge d'espace dans une LBE

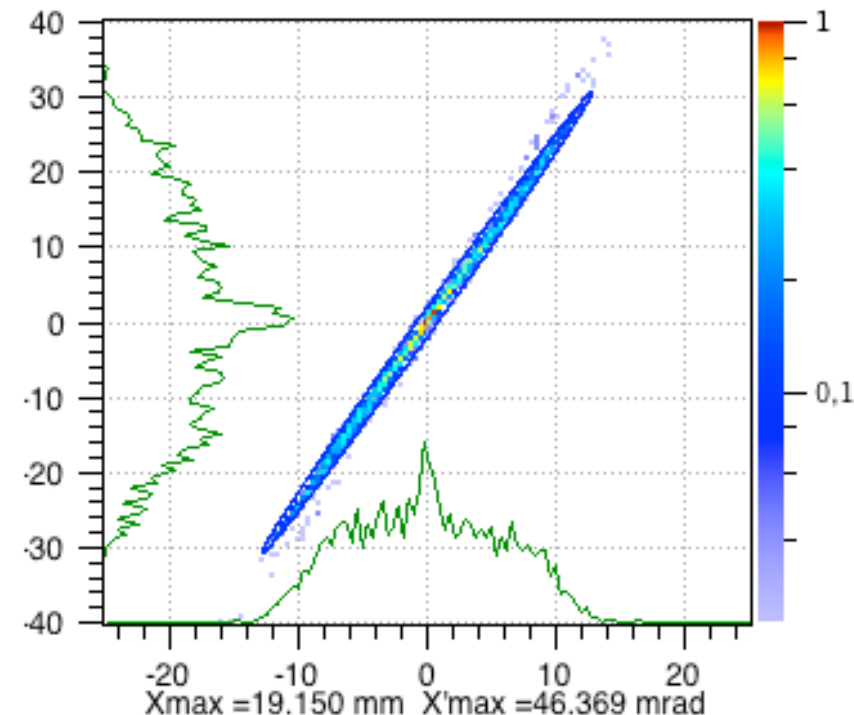
- Ligne de transport SILHI de 100 mA de protons.
- Neutralisation de la charge d'espace par ionisation du gaz résiduel et émission secondaire.
- Le caractère transitoire est à intégrer pour les linéaires pulsés.
- L'influence de plusieurs paramètres implique une charge d'espace résiduelle significativement compensée mais très fortement non linéaire.
- La variation de la pression impacte localement l'état d'équilibre.
- Un bon accord entre SolMaxP et l'expérience.

Ele: 0  
PlotWin - CEA/DSM/IRFU/SACM  
X(mm) - X'(mrad)



Mesure  
 $\epsilon_{rms} = 0,074\pi \text{ .}\mu\text{rad}$

Ele: 24  
PlotWin - CEA/DSM/IRFU/SACM  
X(mm) - X'(mrad)



Simulation  
 $\epsilon_{rms} = 0,072\pi \text{ .}\mu\text{rad}$

# Les simulations globales en mode multipaquets

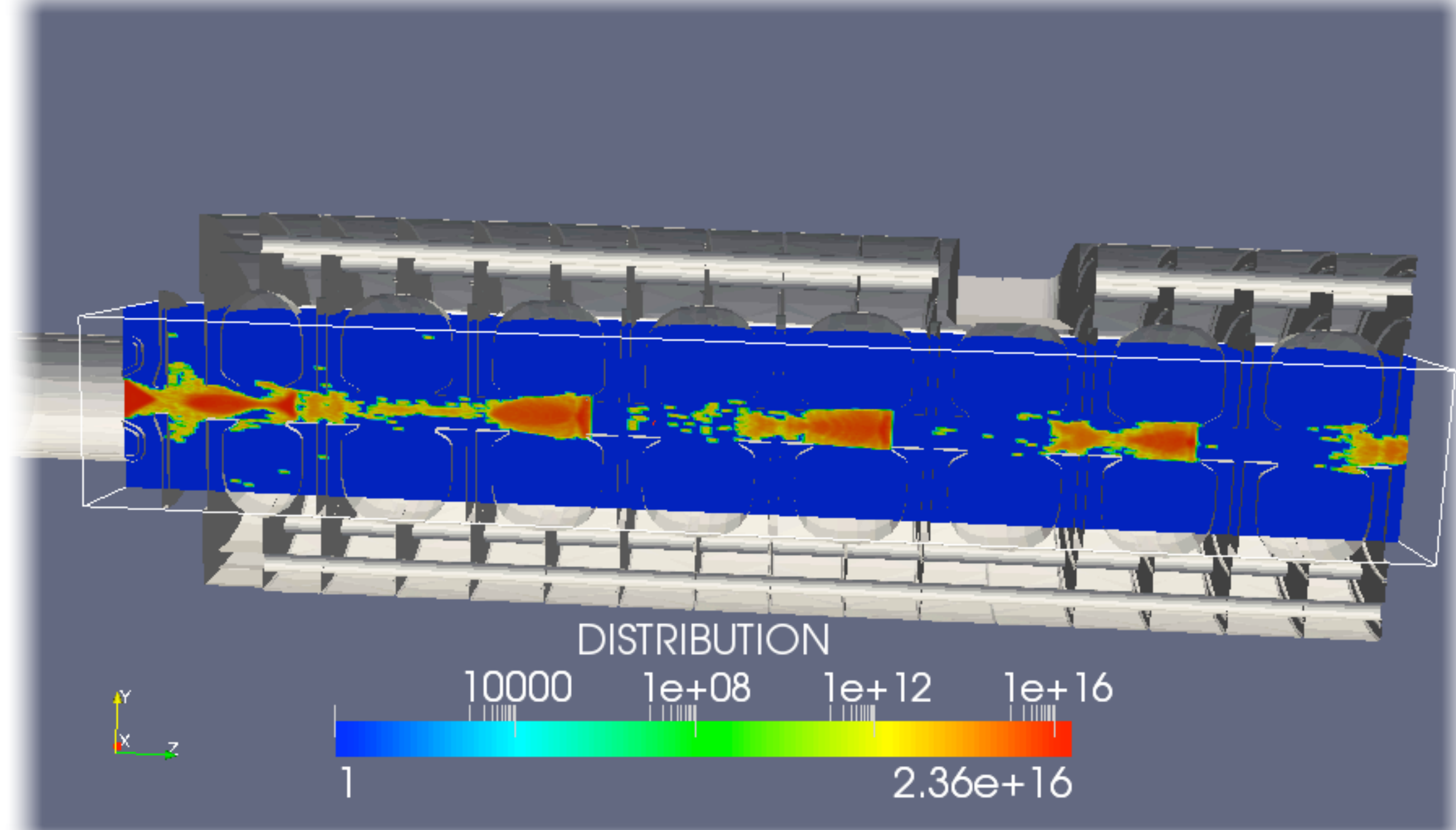
Simulation SolMaxP d'un linac 5 MeV complet

(10,5 millions d'éléments, 64 proc.)

I r f u

cea

saclay



# Accélération par laser

I r f u

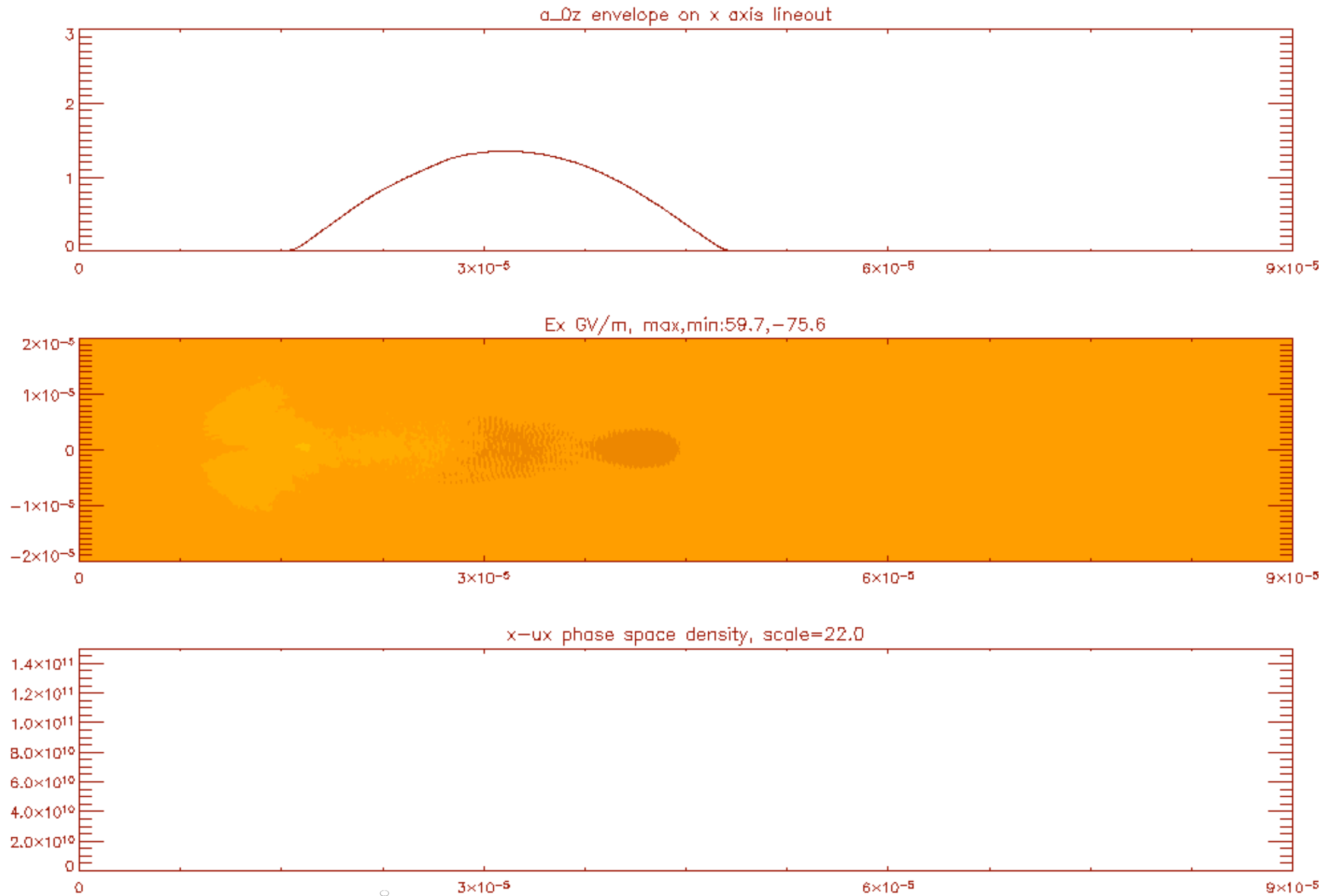
cea

saclay





# Accélération par laser



# Générateur RF (code MAGIC)

I r f u

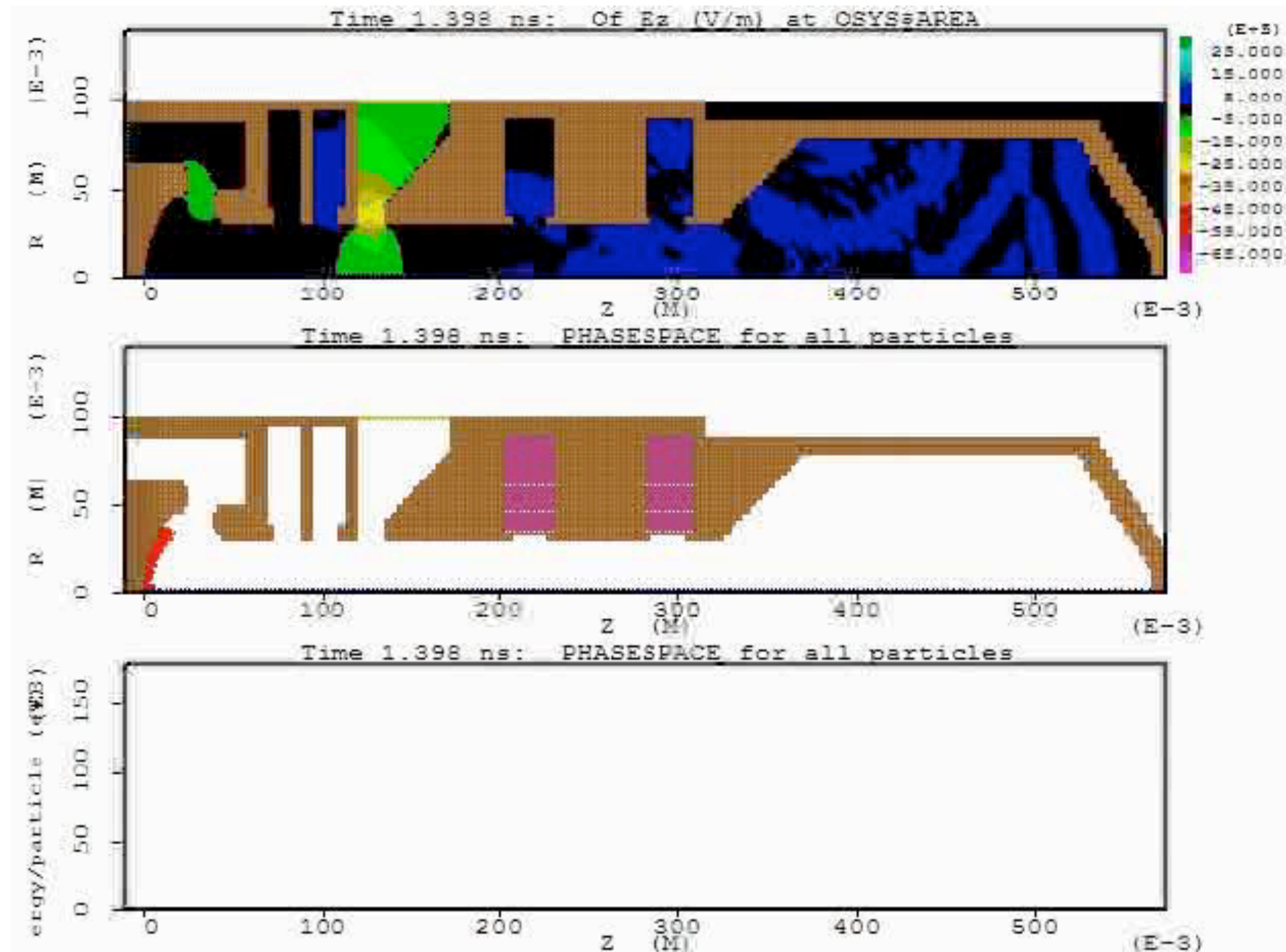
cea

saclay



A premier aerospace and defense company

# Générateur RF (code MAGIC)



A premier aerospace and defense company

# Quelles perspectives françaises et européennes?

I r f u  
cea  
saclay

SciDAC - DOE's Scientific Discovery through Advanced Computing

http://www.scidac.gov/

Labos Sciences Computer Sciences Enseignement Mac Voyages-Dépl. Shopping Caves Home Media Divers

consister : définition, synonymes... SciDAC - DOE's Scientific Discov... alodine - English-French Diction...

**SciDAC**  
Scientific Discovery through Advanced Computing

enabling the path to petascale

Home | Mission | about SciDAC | Contact Us

Office of Science

**Background**

**Science Applications**

- Physics
- Climate
- Groundwater
- Fusion Energy
- Life Sciences
- Materials & Chemistry

**SciDAC Institutes**

**Collaboratories**

**Enabling Technologies**

- Applied Mathematics
- Computer Science
- Visualization & Data Mgt.

**SciDAC Outreach**

**Participating Orgs**

**Grant Solicitations**

- FY2007
- FY2006
- FY2005
- FY2004
- FY2001

**Collateral Materials**

**Extreme Scale Workshops**

The U.S. Department of Energy's **Scientific Discovery through Advanced Computing (SciDAC)** program brings together the nation's top researchers to tackle challenging scientific problems. The Office of [Advanced Scientific Computing Research](#) in DOE's Office of Science supports multidisciplinary SciDAC projects aimed at developing future energy sources, studying global climate change, accelerating research in designing new materials, improving environmental cleanup methods, and understanding physics from the tiniest particles to massive supernovae explosions.

The [summary report](#) from the Basic Energy Sciences workshop "Discovery in Basic Energy Sciences: The Role of Computing at the Extreme Scale" is now posted, along with presentations and reports from the previous [Climate](#), [High Energy Physics](#), [Nuclear Physics](#), [Fusion Energy](#), and [Nuclear Energy](#) workshops. [Links to other workshops in the series.](#)

[Presentations are posted from SciDAC 2009](#)

**SciDAC Review Issue 14 (Fall 2009) now available online**

The Fall Issue (#14) of SciDAC Review includes an interview with Dr. Steven E. Koonin, DOE's new Under Secretary for Science. Feature stories include molecular modeling, electronic structure calculations, multicore computing, and data analysis.

**PETSc named to R&D 100**

**PETSc** (pronounced PET-see), a suite of data structures and routines for the scalable (parallel) solution of partial differential equations (PDEs), has been named an R&D 100 winner in the software category. The PETSc team, lead by Barry Smith of Argonne National Laboratory, is part of the [TOPS](#) SciDAC project and also receives funding from the ASCR Base Math program. [complete list of R&D 100 winners](#)



# Quelles perspectives françaises et européennes?

The screenshot shows a web browser window displaying the website for the Advanced Computations Department at SLAC. The browser's address bar shows the URL <http://www.slac.stanford.edu/grp/acd/ace3p.html>. The website features a navigation menu with options like 'Labos', 'Sciences', 'Computer Sciences', 'Enseignement', 'Mac', 'Voyages-Dépl.', 'Shopping', 'Caves', 'Home', 'Media', and 'Divers'. The main content area is titled 'Advanced Computational Electromagnetics 3P - 3D parallel finite-element based code suite'. Below this title, there are several code modules listed with their respective descriptions and small images:

- ACE3P** (selected): Omega3P, S3P, T3P, Track3P, Pic3P, TEM3P, Visualization
- Omega3P**: Eigenvalue solver for finding the normal modes in an RF cavity
- S3P**: S-parameter solver to calculate the transmission properties of open structures
- T3P**: Time-domain solver to calculate transient field response of a electromagnetic structure to imposed fields, and dipole or beam excitations
- Track3P**: Particle tracking code with surface physics included to study dark current and multipacting in RF cavities
- Pic3P**: Solves Maxwell's equations along with moving charged particles in a self-consistent manner
- TEM3P**: Performs integrated electromagnetic, thermal, and mechanical analysis

The footer of the website includes the SLAC logo, the text 'SLAC National Accelerator Laboratory, Menlo Park, CA Operated by Stanford University for the U.S. Dept. of Energy', and the Office of Science logo.