

SIMULACION NUMERICA DE PLASMAS DE VLASOV

Silvina Ponce Dawson*, Constantino Ferro Fontán+ y
Alberto D. Verga++
Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE), CONICET
Casilla de Correo 67, Suc. 28, 1428 Buenos Aires

RESUMEN

Se presenta un código que simula el desarrollo de la turbulencia electrostática en un plasma no colisional de dos especies, integrando simultáneamente las ecuaciones cinéticas de Vlasov y la ecuación de Poisson para el campo eléctrico. El método de elementos finitos es utilizado como la forma más natural y económica de eludir la inestabilidad dinámica intrínseca en sistemas con un elevado número de grados de libertad.

1. Introducción

Un plasma es un medio aproximadamente continuo y no lineal, en el que se asientan fenómenos característicos de los fluidos y otros que son privativos de las interacciones de las partículas cargadas que lo integran con el campo electromagnético (p.ej. resonancias onda-partícula). Posee un rico espectro de excitaciones colectivas, longitudinales (como

- * Becaria de iniciación del CONICET. Dirigir la correspondencia.
- + Miembro de la Carrera del Investigador Científico. Integrante del Programa de Investigaciones en Física del Plasma (PRIFIP), CONICET-Universidad de Buenos Aires.
- ++ Becario Externo del CONICET, Ecole Polytechnique, Palaiseau, Francia.

en la acústica) y transversales (como en la óptica), lo cual, sumado al carácter no-lineal del medio, da como resultado un extraordinariamente complejo panorama de la turbulencia [1]. Además en presencia de un campo magnético, el plasma tiene comportamiento anisótropo. En pocas palabras, se resumen en él todas las imaginables complicaciones de los sistemas vibrantes.

Por otra parte, es indispensable entender los fenómenos que tienen lugar en un plasma. Los plasmas naturales ocupan casi todo el universo, excepto la corteza fría de los planetas, y el hombre los produce en sus laboratorios con la esperanza de llegar a reproducir un plasma estelar, que satisfaga sus necesidades de energía por medio de la fusión nuclear.

Un dato importante es que los plasmas quiescentes, es decir los que están en equilibrio termodinámico o se apartan muy poco de él, son una verdadera rareza. Más concretamente, las funciones de distribución de velocidades de electrones y de iones no son, por lo general, maxwellianas, o sus valores medios y dispersiones no coinciden, dando lugar al paso de una corriente eléctrica y fenómenos de relajación térmica. En estas situaciones, el plasma dispone, hablando en términos termodinámicos, de una energía libre, de la cual trata de desembarazarse para acceder a un estado quiescente. La transición es intentada espontáneamente, cuando la energía libre supera cierto umbral, mediante la excitación de uno o varios modos colectivos de oscilación, que pueden realimentarse no-linealmente llevando al plasma a un estado turbulento. Las interacciones onda-partícula que entonces se producen modifican, a su vez, las funciones de distribución, alcanzándose un estado de régimen caracterizado por un crecimiento importante de la energía de los campos, y por la esporádica aparición de fenómenos coherentes de espectaculares consecuencias, como la expulsión de haces acelerados de partículas, pulsos de radiación electromagnética, etc. Además, la turbulencia de plasma altera totalmente las propiedades de transporte.

Para penetrar en la compleja madeja de la física que acabamos de esbozar, la teoría no se puede apoyar en los métodos tradicionales de la física matemática, inspirados en técnicas lineales. Es necesario incorporar la computadora como herramienta teórica y como "laboratorio" sui generis, en el cual es posible montar "experimentos" en que distintos elementos de la teoría son probados a voluntad, como si se tratara de ensamblar un rompecabezas intelectual.

Frente a la magnitud importante de los cálculos que deben realizarse, los códigos de simulación requieren particular atención [2]. Los tratamientos pueden dividirse en dos grandes grupos: la simulación con partículas de plasma, y la resolución de la ecuación cinética de Vlasov. Los primeros consisten en resolver las ecuaciones de movimiento de un gran número de partículas cargadas en los campos, autoconsistentemente determinados, del sistema. Para ser realistas, estas simulaciones deben reproducir un número adimensional característico, el parámetro de plasma, que es el número de partículas en la celda de Debye, de tamaño λ_D . Esta longitud es el camino medio que un electrón termalizado recorre en un tiempo característico de plasma, igual a $1/\omega_{pe}$, siendo ω_{pe} la frecuencia de plasma con que los electrones responden a una alteración de la neutralidad eléctrica. Además, la longitud L del sistema simulado tiene que ser, por lo menos, un par de órdenes de magnitud superior a λ_D , para que los electrones no abandonen el sistema en unas pocas oscilaciones del plasma. Por ejemplo, si $L = 128 \lambda_D$ y un parámetro de plasma realista es 512, necesitaremos 64 K partículas como mínimo en una simulación unidimensional, cantidad que debe multiplicarse por el número de datos por partícula que es necesario almacenar. Todos estos datos ingresan, a su vez, en el cómputo autoconsistente del campo eléctrico, lo que impone grandes exigencias de velocidad al equipo utilizado. El número de partículas de simulación puede reducirse algo, pero a expensas de emplear algoritmos sofisticados, que requieren más cálculo.

El segundo método consiste en resolver las ecuaciones cinéticas de Vlasov (ver la próxima sección) para las funciones de distribución en el espacio de fases (posición y velocidad) de las especies cargadas presentes en el plasma. Los campos electromagnéticos deben obtenerse integrando las ecuaciones de Maxwell. Estas se reducen, en el caso unidimensional electrostático, a la ecuación de Poisson. Aquí se tropieza con una dificultad de naturaleza diferente, pero que podría saturar rápidamente la capacidad de los equipos más poderosos, y que se origina en la inestabilidad dinámica de los sistemas mecánicos con muchos grados de libertad. La ecuación de Vlasov es una ecuación cinética sin colisiones, que preserva la información contenida en las condiciones iniciales. Pero, durante la evolución del sistema, esta información se distribuye sobre el espacio de fases formando una intrincada y finísima filigrana, ya que puntos originalmente muy próximos se separan exponencialmente con el tiempo. Evidentemente, mantener la información exigiría aumentar, con velocidad tam-

bién exponencial, la capacidad de memoria (se trata de un problema intrínsecamente no computable). En realidad, no sirve de nada aumentar la resolución del espacio de fases hasta tales extremos. En otras palabras, la dificultad desaparece si, a cada paso de tiempo, se emplea un algoritmo disipativo que promedie localmente las funciones de distribución, manteniendo constante la escala de resolución del espacio de fases [3]. En términos termodinámicos, tal algoritmo transfiere entropía a las partículas y energía libre a las ondas. La técnica de elementos finitos, en el espacio de fases de las partículas, constituye, en forma natural, el algoritmo deseado [4], y desde el punto de vista computacional resulta más económica que la simulación con partículas. Por esta razón la hemos adoptado para nuestro "laboratorio numérico" de plasmas turbulentos.

2. Ecuaciones básicas y condiciones de contorno

Nuestro objetivo es simular un plasma de electrones (e) e iones (i), unidimensional con condiciones de contorno espacialmente periódicas.

Las ecuaciones que debemos resolver son:

$$\frac{\partial f^e}{\partial t} + v \frac{\partial f^e}{\partial x} - E \frac{\partial f^e}{\partial v} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial f^i}{\partial t} + v \frac{\partial f^i}{\partial x} + \frac{E}{m_i} \frac{\partial f^i}{\partial v} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \int (f^i - f^e) dv \quad (2.3)$$

donde todas las cantidades han sido dimensionalizadas convenientemente.

Limitamos el espacio de velocidades a una región finita, centrada en $v = 0$. Definimos entonces una velocidad máxima para los electrones (v_{maxe}) y otra para los iones (v_{maxi}). De este modo las condiciones de contorno resultan

$$f^e(0, v, t) = f^e(L, v, t)$$

$$f^i(0, v, t) = f^i(L, v, t)$$

$$E(0, t) = E(L, t)$$

$$f^0(x, v_{\max e}, t) = f^0(x, -v_{\max e}, t) = 0$$

$$f^1(x, v_{\max i}, t) = f^1(x, -v_{\max i}, t) = 0$$

La elección de $v_{\max e}$, $v_{\max i}$ y de las condiciones iniciales $f^0(x, v, 0)$ y $f^1(x, v, 0)$ varía según el fenómeno de interés.

3. Modelo discreto

3.1 Funciones de distribución.

Para la resolución del conjunto de ecuaciones (2.1 - 2.3) construimos un modelo discreto del espacio de fases (x, v) de protones y electrones, dividiéndolo en elementos finitos rectangulares de área $\Delta x \Delta v$, en cuyos cuatro nodos se definen los valores de las funciones de distribución $f_{ij}^s(t)$. Calculamos el valor de dichas funciones en puntos intermedios mediante la interpolación:

$$f^s(x, v, t) = \sum_{ij} a_i(x) a_j(v) f_{ij}^s(t) \quad (3.1)$$

donde las funciones de interpolación son

$$a_j(z) = \begin{aligned} & (z - z_{j+2} \Delta z) \cdot (z - z_{j+1} \Delta z) / (2 \Delta z)^2, \quad z_{j+2} \ll z \ll z_{j+1} \\ & (-z + z_{j+4} \Delta z) \cdot (z - z_{j+1} \Delta z) / (2 \Delta z)^2, \quad z_{j+1} \ll z \ll z_j \\ & (-z + z_{j-4} \Delta z) \cdot (z - z_{j-1} \Delta z) / (2 \Delta z)^2, \quad z_j \ll z \ll z_{j+1} \\ & (z - z_{j-1} \Delta z) \cdot (z - z_{j-2} \Delta z) / (2 \Delta z)^2, \quad z_{j+1} \ll z \ll z_{j+2} \end{aligned}$$

(3.2)

Esta es una representación de segundo orden ya que es equivalente a un desarrollo de las f^s en términos del valor de la función y de sus derivadas en los nodos. Además las funciones de interpolación elegidas conservan los tres primeros momentos de las funciones de distribución [3]. Para los valores en la frontera hacemos un tratamiento diferente según se trate de la interpolación espacial o de la correspondiente a las ve-

locidades. En el primer caso, como las condiciones de contorno son periódicas, la grilla se repite periódicamente para todos los valores de x . Al cubrir toda la franja $-\infty < x < +\infty$, $|v| < v_{max}$, no hay problemas en la frontera. Para el segundo caso podemos extender la grilla definiendo los valores de la función en los nuevos nodos iguales a cero. Es decir

$$f_{ij}^{e,l} = 0 \text{ si } |v_j| > v_{maxe,l} .$$

De este modo, las funciones de Interpolación definidas en 3.2 sirven para obtener los valores en cualquier punto del espacio de las fases.

3.2 Campo eléctrico.

Como el campo eléctrico no depende de las velocidades y el problema es periódico en la coordenada espacial, usamos una interpolación de Fourier. Definiendo los coeficientes

$$\begin{aligned} a_k^{(E)} &= (2/NN) \sum_{i=1}^{NN} E_i \cos(k_0 k x_i) , & 0 \leq k \leq NN/2 \\ b_k^{(E)} &= (2/NN) \sum_{i=1}^{NN} E_i \sin(k_0 k x_i) , & 1 \leq k \leq NN/2-1 \end{aligned} \quad (3.3)$$

con $NN=NX-1$; $k_0=2\pi/L$,

el campo eléctrico en un punto cualquiera se escribe como

$$\begin{aligned} E(x) &= 0.5 a_0^{(E)} + \sum_{k=1}^{NN/2-1} (a_k^{(E)} \cos(k_0 k x) + b_k^{(E)} \sin(k_0 k x)) + \\ &+ 0.5 a_{NN/2}^{(E)} \cos(k_0 (NN/2)x) . \end{aligned} \quad (3.4)$$

4. Esquema numérico

4.1 Separación del sistema original.

En lugar de resolver el conjunto de ecuaciones (2.1 - 2.3) en cada paso temporal, lo separamos del siguiente modo [5]:

- a) Se traslada la distribución según x durante medio paso temporal $\Delta t/2$, Integrando la ecuación

$$\frac{\partial f^s}{\partial t} + v \frac{\partial f^s}{\partial x} = 0 \quad (4.1)$$

- b) Se actualiza el campo eléctrico resolviendo la ecuación de Poisson.

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \int [f^i(x, v, t + \Delta t/2) - f^e(x, v, t + \Delta t/2)] dv \quad (4.2)$$

- c) Se traslada la distribución según v durante todo el paso temporal Δt . Esta operación no altera la actualización de campo eléctrico efectuada en (b), porque la coordenada x , de la cual depende la densidad de carga eléctrica, se mantiene fija. La traslación se efectúa mediante integración de la ecuación

$$\frac{\partial f^s}{\partial t} \pm \frac{E}{m_s} \frac{\partial f^s}{\partial v} = 0 \quad (4.3)$$

cuyo doble signo corresponde a la carga de iones y electrones respectivamente.

- d) Finalmente, se completa la traslación en x , por el medio paso temporal faltante, utilizando (4.1).

Este procedimiento termina una iteración, y es seguido por el paso (a) de la siguiente. Como se trata de la misma ecuación diferencial, es posible unificarlos salvo al comenzar o al terminar la simulación.

El esquema de separación empleado asegura que la solución del sistema original es correcta hasta el segundo orden en Δt .

4.2 Método de resolución.

El problema se reduce ahora a resolver la ecuación de Poisson y ecuaciones de la forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + F \frac{\partial f}{\partial z} = 0 \quad (4.4)$$

donde F no depende de z .

La ecuación (4.4) puede ponerse en la forma

$$\frac{\partial f}{\partial t}_k + F_k \frac{\partial f}{\partial z}_k = 0 \quad (4.5)$$

donde en un caso es $f_k(z, t) = f(x, v_k, t)$

$$F_k = v_k \quad (4.6)$$

y en el otro es $f_k(z, t) = f(x_k, v, t)$

$$F_k = \pm E_k / m_s \quad (4.7)$$

$$z = v$$

Por lo tanto, integrar las ecuaciones de Vlasov es equivalente a resolver la ecuación

$$\mathcal{L}_k f_k(z, t) = 0 \quad (4.8)$$

donde \mathcal{L}_k es el operador definido por la (4.5). Dada la expansión de las $f_k(z, t)$ en términos de los valores en los nodos

$$f_k(z, t) = \sum_j a_{kj}(z) f_{kj}(t) \quad (4.9)$$

usamos para resolver la (4.8) el método de los residuos pesados, que consiste en elegir un conjunto de funciones de peso $w_n(z)$, de tal modo que se anule el valor promediado del residuo

$$r_k = \mathcal{L}_k f_k(z, t) \quad ,$$

y por lo tanto

$$\int w_n(z) \mathcal{L}_k f_k(z, t) dz = 0 \quad (4.10)$$

Elegimos las funciones de peso iguales a las de interpolación a_{kj} (método de Galerkin). De este modo la ecuación (4.10) queda en la forma

$$\sum_j \int a_i(z) a_j(z) dz \dot{f}_{kj} + \sum_j \int a_i(z) \frac{\partial a_j}{\partial z} F_k f_{kj} dz = 0 \quad (4.11)$$

Escribiendo la derivada temporal y la función, en el instante $t+\Delta t/2$ como

$$\dot{f}_{kj}(t+\Delta t/2) = [f_{kj}(t+\Delta t) - f_{kj}(t)] / \Delta t \quad , \quad (4.12)$$

$$f_{kj}(t+\Delta t/2) = [f_{kj}(t+\Delta t) + f_{kj}(t)] / 2 \quad (4.13)$$

la integración de la ecuación (4.5) se reduce entonces a la resolución de sistemas algebraicos de la forma

$$\sum_j C_{ij} f_{kj}(t+\Delta t) = \sum_j D_{ij} f_{kj}(t) \quad (4.14)$$

donde los elementos de las matrices $(C_{ij})(D_{ij})$ son

$$\begin{aligned} C_{i, i-2} &= -1+5h/4 \quad , \quad D_{i, i-2} = -1-5h/4 \quad \text{para todo } 2 < i < n \\ C_{i, i-1} &= 4-10h \quad , \quad D_{i, i-1} = 4+10h \quad \text{" " } 1 < i < n \\ C_{i, i} &= 24 \quad , \quad D_{i, i} = 24 \quad \text{" " } i \\ C_{i, i+1} &= 4+10h \quad , \quad D_{i, i+1} = 4-10h \quad \text{" " } 1 < i < n \\ C_{i, i+2} &= -1-5h/4 \quad , \quad D_{i, i+2} = -1+5h/4 \quad \text{" " } 1 < i < n-1 \end{aligned}$$

(4.15)

con $h = F_k \Delta t / \Delta z$ y $n =$ orden de la matriz.

Para la integración de (4.3) (Integración de la velocidad) los otros elementos de las matrices son nulos. Para la integración de (4.1) pueden extenderse las definiciones para todos los valores de l , entendiendo que un subíndice j no comprendido entre 1 y n representa a otro k tal que $k = j(n)$ (congruente módulo n) y $1 \leq k \leq n$.

Vemos entonces que para integrar la ecuación (4.1) debemos resolver tantos sistemas de la forma del (4.14) como puntos haya en la grilla de velocidades y , para integrar la (4.3), debemos hacer algo análogo pero en este caso el número de sistemas (4.14) será el de puntos de grilla según x .

En lo que se refiere a la ecuación de Poisson, el hecho de usar una interpolación de Fourier para el campo eléctrico permite resolverla en el espacio conjugado y después antitransformar la solución. Para ello derivamos la expresión (3.4) respecto de x y la igualamos a un desarrollo de Fourier de la densidad eléctrica ρ similar al (3.4). De esta forma obtenemos la relación que deben satisfacer los coeficientes de uno y otro desarrollo:

$$\begin{aligned} a_k(E) &= -b_k(\rho) / k k_0 \\ b_k(E) &= a_k(\rho) / k k_0 \quad \text{para todo } 1 \leq k \leq NN/2-1. \end{aligned}$$

Como el plasma es eléctricamente neutro debe ser $a_0^{(\rho)} = 0 = a_{NN/2}^{(\rho)}$. La condición de periodicidad de todas las cantidades y , en particular, del potencial electrostático, determina que deben anularse los coeficientes $a_0(E)$ y $a_{NN/2}(E)$. De este modo quedan determinados todos los coeficientes $a_k(E)$ y $b_k(E)$, por lo tanto, el valor del campo eléctrico.

5. Detalles del programa y presentación de resultados

Para la integración del sistema algebraico (4.14) usamos una subrutina adecuada a matrices k -diagonales (con $k \leq n$, n : orden de la matriz)

[6]. En el caso de la integración en velocidades la matriz C es pentadiagonal. No ocurre lo mismo para la integración en x. Como, de todos modos, la matriz C es rara usamos una rutina que, mediante una permutación de filas y columnas la lleva a una matriz banda de 11 diagonales [6] y de este modo podemos volver a utilizar la misma rutina que en el caso de la integración en velocidades.

Para el cálculo de los coeficientes de Fourier de la densidad eléctrica y para la antitransformación del campo eléctrico usamos una transformada rápida de Fourier.

El tiempo de CPU utilizado por iteración depende casi linealmente del número de puntos de grilla. Utilizando un equipo IBM 370/158, se consumen aproximadamente 6 seg. por iteración para $NX = 33$, $NVE = 128$, $NVI = 64$; para $NX = 33$, $NVE = 256$ y $NVI = 128$, el tiempo es de unos 10 seg. por iteración.

Conocidas las funciones de distribución y el campo eléctrico obtenemos los siguientes diagnósticos:

- a. Funciones de distribución de velocidad

$$f^s(v, t) = \int_0^L f^s(x, v, t) dx$$

- b. Densidad eléctrica

$$\rho(x, t) = \int [f^i(x, v, t) - f^e(x, v, t)] dv$$

- c. Número de electrones y de iones por unidad de longitud

$$n_e(x, t) = \int f^e(x, v, t) dv$$

$$n_i(x, t) = \int f^i(x, v, t) dv$$

- d. Energía electrostática

$$W_{el}(t) = \int_0^L E^2(x, t) d(x/L)$$

- e. Número de partículas, cantidad de movimiento y energía de cada especie

$$N_s = \int_0^L dx \int dv f^s(x, v, t)$$

$$P_s = \int_0^L dx \int dv f^s(x, v, t) m_s v$$

$$W_s = \int_0^L dx \int dv f^s(x, v, t) m_s v^2 / 2$$

Como al hacer la integración temporal conectamos dos integraciones sucesivas en x , el programa nos da los valores de la función de distribución en instantes que son múltiplos semienteros de Δt . Para conocerla en múltiplos enteros de Δt hacemos

$$f(t+\Delta t) = 0.5 [f(t+1.5 \Delta t) + f(t+0.5 \Delta t)]$$

y con estos valores se calculan los diagnósticos descriptos. Por otro lado, el hecho de conocer la función de distribución nos da información sobre la evolución en el espacio de las fases y, el conocer los coeficientes de Fourier del campo eléctrico, nos permite obtener el espectro de números de onda.

En las figuras se muestran algunos resultados que simulan condiciones inestables del plasma. En el primer caso, se impuso un campo eléctrico externo $E_{ext} = 0.01 T/e\lambda_D$, donde T es la temperatura del plasma, inicialmente maxwelliano, isotérmico y en reposo. Este campo origina una corriente de deriva electrónica, que modifica las funciones de distribución, como se ve en la Fig.1, que corresponde a un instante $t = 650/\omega_{pe}$. En esta simulación, el cociente $m_i/m_e = 100$. La Fig.2 muestra el crecimiento de la energía electrostática (en unidades de la energía térmica, escala logarítmica), hasta tiempos del orden de $1100/\omega_{pe}$. Se observa la saturación de la turbulencia electrostática a un nivel comparable con la energía térmica (régimen de turbulencia fuerte). En la Fig.3 se ha simulado la formación de estructuras no-lineales en el plasma [1]. Un plasma con $m_i/m_e = 4$ es perturbado a $t = 0$ modulando la densidad electrónica con una senoide. Se muestran los perfiles espaciales de densidad iónica n_i y campo eléctrico E , a $t = 190/\omega_{pe}$, según resultan de la amplificación no-lineal, efectuada por el plasma, de la perturbación inicial. Obsérvese la formación de un cavitón, entre 20 y $30 \lambda_D$, en el gráfico de la densidad. Este cavitón coincide con un máximo del campo eléctrico, que produce el efecto ponderomotriz responsable de la expulsión de iones de la zona del cavitón.

En resumen, el código de Vlasov que aquí se presenta, desarrollado en base al método de elementos finitos, ha sido ensayado en diversas situaciones típicas, demostrando un buen rendimiento. En sus próximas apli-

caciones se pondrá a prueba su capacidad como herramienta de investigación en teoría de plasmas turbulentos.

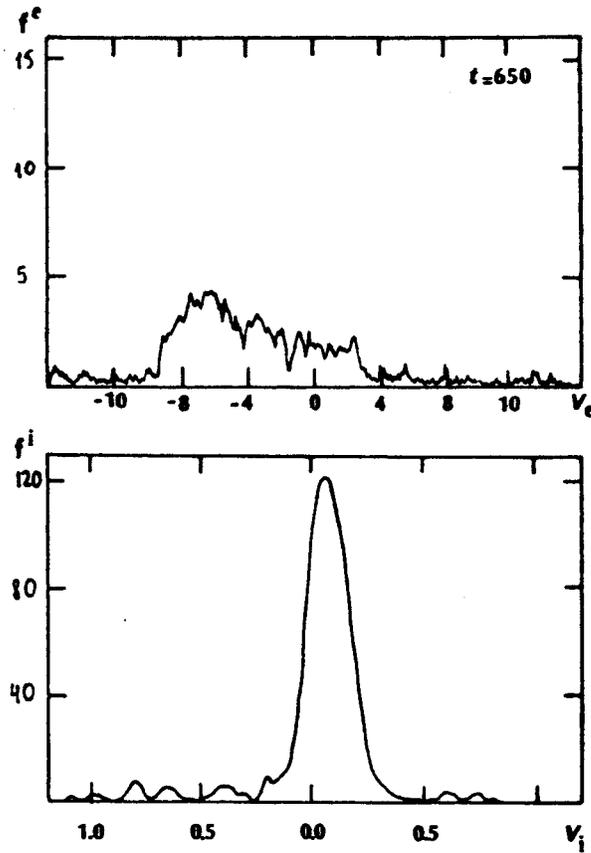
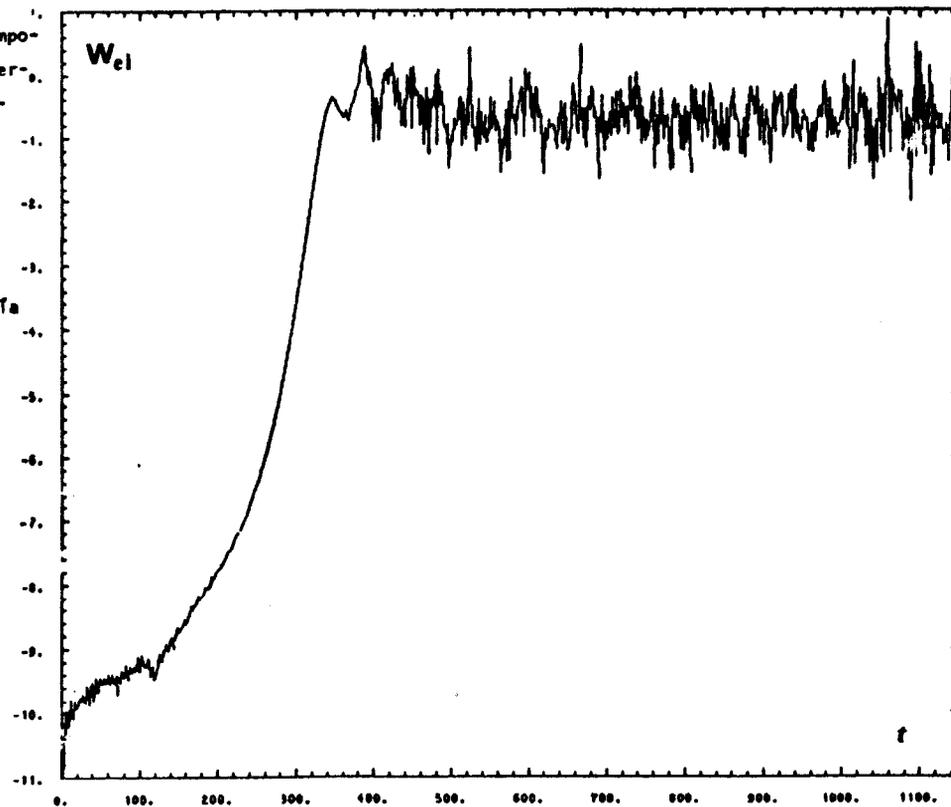


Fig.1. Función de distribución de velocidades, de electrones e iones, a $t = 650/\omega_{pe}$. El plasma está sometido a un campo eléctrico externo. Las velocidades se dan en unidades de la velocidad térmica electrónica. La fuerte deriva favorece el desarrollo de la inestabilidad de Buneman.

Fig.2. Evolución temporal de la energía electrostática durante el desarrollo y la saturación no lineal de la inestabilidad de Buneman. En ordenadas el logaritmo de $(W_{el}/\text{energía térmica})$. El tiempo se da en $1/\omega_{pe}$.



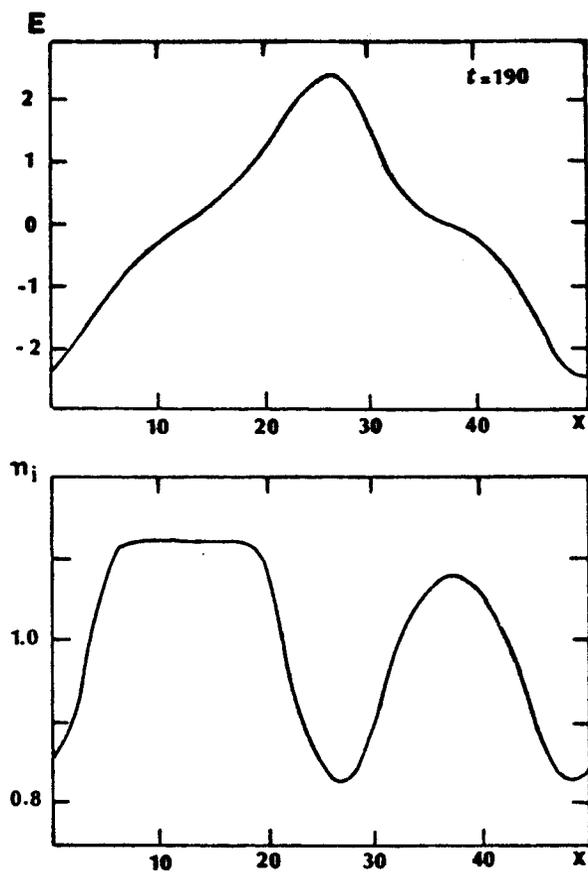


Fig.3. Perfiles de campo eléctrico E y densidad iónica n_i , a $t = 190/\omega_{pe}$, durante la formación de un cavitón en un plasma modulado inicialmente por una onda sinusoidal de densidad electrónica.

REFERENCIAS

- [1] Goldman M.V., 1984, Revs.Mod.Phys. 56, 709.
- [2] Birdsall C.K., Langdon A.B., 1984, "Plasma Physics via Computer Simulation", McGraw-Hill, New York.
- [3] Benavit J., 1972, J.Computational Phys. 9, 75.
- [4] Erz U., 1981, Tesis doctoral, Universidad de Stuttgart.
- [5] Cheng C.Z., Knorr G., 1976, J.Computational Phys. 22, 330.
- [6] Meis T., Marcowitz U., 1981, "Numerical Solution of Partial Differential Equations", Applied Math.Sc.32, Springer-Verlag, New York.