

COMPARACIÓN DE ESQUEMAS DE SEGUNDO ORDEN BASADOS EN DIFERENCIAS FINITAS Y VOLÚMENES FINITOS PARA LA SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE VLASOV EN EL CASO NO MAGNETIZADO

COMPARISON OF SECOND ORDER FINITE-DIFFERENCE AND FINITE-VOLUME BASED SCHEMES FOR THE SOLUTION OF THE VLASOV EQUATION IN THE UNMAGNETIZED CASE

Denis Lorenzon^{a,b} y Sergio A. Elaskar^{a,b}

^a*Instituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología (IDIT), CONICET - Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez Sarsfield 1611, 5000 Córdoba, Argentina, <http://www.inv.idit.efn.uncor.edu/>*

^b*Departamento de Aeronáutica, Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez Sarsfield 1611, 5000 Córdoba, Argentina, <http://www.portal.efn.uncor.edu/>*

Palabras clave: Física de plasmas computacional, Vlasov-Poisson, métodos Eulerianos

Resumen. La ecuación de Vlasov describe la evolución temporal de la función de distribución de las partículas en un plasma no colisional, y provee una descripción cinética completa del plasma cuando la dinámica de las partículas está gobernada por interacciones electromagnéticas de largo alcance. Si los campos magnéticos auto generados y externos son despreciables, entonces la fuerza de Lorentz se debe sólo al campo eléctrico, el cual puede computarse a partir de la ecuación de Poisson en el caso no relativista. En este artículo, se presentan discretizaciones de segundo orden, basadas en diferencias finitas y en volúmenes finitos, para la resolución del sistema Vlasov-Poisson sobre un espacio de fases bidimensional. La precisión de los esquemas se evalúa y compara a través del problema de pruebas clásico del amortiguamiento de Landau. Además, son examinadas algunas propiedades de conservación importantes del sistema Vlasov-Poisson, como el principio del máximo y la conservación de momentos de la función de distribución.

Keywords: Computational plasma physics, Vlasov-Poisson equations, Eulerian methods

Abstract. The Vlasov equation describes the temporal evolution of the distribution function of particles in a collisionless plasma and provides a complete kinetic description of the plasma when the dynamics of the particles is ruled by long range electromagnetic interactions. If the externally applied and self consistent magnetic fields are negligible, the Lorentz force is due to the electric field only, which in the non-relativistic case, is computed from the Poisson equation. In this article, we present finite-difference discretizations and finite-volume conservative discretizations, which are both second order in space, for the solution of the 2-Dimensional Vlasov-Poisson system. The accuracy of the schemes is evaluated and compared through the classical Landau damping benchmark problem. Some important conservation properties of the Vlasov-Poisson system, as the maximum principle and the conservation of moments of the distribution function, are also examined.

1. INTRODUCCIÓN

La ecuación de Vlasov describe la evolución temporal de un sistema de partículas cargadas eléctricamente bajo los efectos de campos electromagnéticos auto generados y aplicados externamente. El acoplamiento con los campos auto generados se tiene en cuenta a través de las ecuaciones de Maxwell o Poisson. Si tanto los campos magnéticos externos como los auto generados son insignificantes, entonces la fuerza de Lorentz se debe únicamente al campo eléctrico, el cual se puede calcular a partir de la ecuación de Poisson en el caso no relativista.

Actualmente, se usan dos familias de métodos numéricos para resolver la ecuación de Vlasov: los métodos de partículas *Particle-In-Cell* (PIC) y métodos Eulerianos (también llamados continuos, directos o basados en grillas). Los métodos PIC, que son los más ampliamente utilizados, aproximan al plasma por un número finito de macro-partículas (o súper-partículas), cada una de las cuales representa la masa y la carga de muchas partículas del mundo físico (Birdsall y Langdon, 2005; Hockney y Eastwood, 1988). Las trayectorias de estas macro-partículas siguen las curvas características de la ecuación de Vlasov, mientras que los campos electromagnéticos auto generados se calculan sobre una malla en el dominio físico a partir de los momentos de la función de distribución.

Este método proporciona resultados satisfactorios con un número relativamente pequeño de partículas, lo que permite el modelado de fenómenos a gran escala en dos y tres dimensiones espaciales. El principal inconveniente de este enfoque, es que el ruido numérico inherente a los métodos de partículas puede llegar a ser demasiado importante en algunos casos, y solo disminuye en proporción a $1/\sqrt{N}$, siendo N el número de macro-partículas. Este problema es particularmente grave cuando las estructuras a pequeña escala son de importancia, o cuando la física de interés está en la cola de alta energía de la función de distribución, donde sólo hay una pequeña fracción de las partículas.

Por otro lado, se han propuesto métodos que discretizan la ecuación de Vlasov sobre una malla en el espacio de fases. Estos métodos no sufren del ruido estadístico intrínseco a las simulaciones PIC, pero su aplicación a problemas de cinco o seis dimensiones es poco práctica sino imposible actualmente (Feix y Bertrand, 2005). Se espera que esta situación cambie en el futuro, dado el crecimiento exponencial de la potencia de cómputo y la capacidad de memoria de las computadoras.

Los métodos directos más ampliamente empleados son llamados semi-Lagrangianos advectivos (SL), los cuales consisten en calcular la función de distribución en cada punto de la grilla siguiendo las curvas características de la ecuación de Vlasov hacia atrás en el tiempo. Para determinar el origen de cada característica, en cada paso de tiempo, se necesita algún algoritmo de interpolación. Las curvas de interpolación más utilizadas son *splines* cúbicos (Cheng y Knorr, 1976; Sonnendrücker et al., 1999) y polinomios de alto orden en la forma de Hermite (Filbet y Sonnendrücker, 2003), pero también se han implementado otros esquemas de interpolación locales y no locales (Umeda et al., 2006).

Inspirados en los métodos numéricos para la mecánica de fluidos, se desarrollaron otro tipo de esquemas conocidos como semi-Lagrangianos conservativos, que son la versión basada en volúmenes finitos del método semi-Lagrangiano. En este caso, las incógnitas discretas no son valores puntuales sino promedios de la función de distribución sobre pequeños volúmenes (celdas) que discretizan el espacio de fases. La evolución temporal de estas incógnitas se calcula a partir de los flujos entrantes y salientes a través de las fronteras de cada celda, lo que conduce a la conservación de las partículas. La clase más nueva de métodos no lineales, está basada en una discretización en volúmenes finitos de alto orden del espacio de fases, y una integración

temporal de la ecuación de Vlasov semi discreta usando un esquema Runge-Kutta explícito de cuarto orden (Banks y Hittinger, 2010; Vogman et al., 2018). Se puede utilizar cualquier otro método estable para el avance temporal, incluidos los métodos de tipo Runge-Kutta implícitos y explícitos, y los de múltiples etapas (*Linear Multistep Methods*).

Todos los métodos Eulerianos mencionados anteriormente, se combinan generalmente con la técnica de separación en el tiempo (o separación dimensional) *splitting*, en cuyo caso se suelen denominar Eulerianos *split*. Esta técnica consiste en dividir la ecuación de Vlasov en ecuaciones advectivas separadas en variables espaciales y de velocidad, y tiene la gran ventaja de que cada una de estas se puede tratar como una ecuación advectiva unidimensional. Particularmente, en la aproximación electrostática, ambas advecciones pueden resolverse como lineales con velocidad constante.

Uno de los principales problemas con los que hay que lidiar al construir soluciones numéricas a la ecuación de Vlasov, junto con las ecuaciones de Poisson o Maxwell, es la filamentación del espacio de fases. La naturaleza Hamiltoniana de la ecuación de Vlasov, es decir, la conservación de la función de distribución a lo largo de las curvas características, ocasiona que regiones con valores muy diferentes de $f(t, x, v)$ que inicialmente estaban muy alejados en el espacio de fases, se acerquen y mezclen produciendo gradientes pronunciados. Esto es lo que se conoce como el problema de la filamentación.

La atención del presente trabajo está restringida a los métodos Eulerianos con *splitting* dimensional, en particular a los basados en diferencias finitas y a los usados más frecuentemente, que son los semi-Lagrangianos advectivos y conservativos (basados en volúmenes finitos). Todos ellos son aplicados a la discretización de la ecuación de Vlasov en el límite electrostático sobre un espacio de fases bidimensional (x, v) . El campo eléctrico, por su parte, se determina en cada paso de tiempo mediante la resolución de la ecuación de Poisson usando un esquema de diferencias finitas centradas de cuarto orden.

El trabajo está organizado de la siguiente manera. En la Sección 2 se introducen las ecuaciones de gobierno, los parámetros característicos y la técnica de *splitting* dimensional. En la Sección 3 se describe brevemente cada uno de los algoritmos implementados. El problema de prueba a resolver y los parámetros numéricos a utilizar se especifican en la Sección 4. Los resultados obtenidos con cada esquema se muestran y comparan en la Sección 5. Finalmente, en la Sección 6, se discuten los resultados y se sacan conclusiones.

2. ECUACIONES DE GOBIERNO

2.1. Función de distribución y ecuación de Vlasov

En un momento dado, cada partícula dentro de un plasma tiene una posición y una velocidad específica. Por lo tanto, si el número de partículas es lo suficientemente grande, es posible definir una densidad de partículas en cada punto (\mathbf{x}, \mathbf{v}) del espacio de fases. La *función de distribución* prescribe esta densidad de partículas instantánea en el espacio $\mathbf{x}-\mathbf{v}$ y se denota como $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$. Luego, $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ será el número de partículas, que en el tiempo t , se encuentran en un entorno del punto \mathbf{x} y tienen una velocidad próxima a \mathbf{v} .

Si se desprecian las colisiones entre partículas, entonces no habrá variaciones discontinuas de las velocidades. Esto implica que las partículas no se crean ni se destruyen en el espacio de fases, y que la función de distribución obedece una ecuación de continuidad. Esta ecuación de continuidad en el espacio de fases es la *ecuación de Vlasov*, la cual en el caso no relativista y

en coordenadas cartesianas se escribe:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{v} f_s) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (\mathbf{a} f_s) = 0 \quad (1)$$

Donde el subíndice en f_s indica que se trata de la función correspondiente a la especie s . La aceleración \mathbf{a} es la debida a la fuerza de Lorentz, esto es:

$$\mathbf{a} = \frac{q_s}{m_s} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (2)$$

Los campos eléctricos y magnéticos a considerar en la fuerza de Lorentz son la suma de los campos auto generados más los aplicados externamente. Por comodidad, en adelante se omitirán los subíndices indicadores de la especie. Notar que esta descripción es más detallada que un modelo de fluido, pero menos detallada que seguir las trayectorias de las partículas individuales. Si se restringen las partículas a una dimensión en el espacio físico (x) y una en el de velocidades (v), y además, se considera que los efectos de los campos magnéticos son despreciables ($\mathbf{E} \gg \mathbf{v} \times \mathbf{B}$), entonces la ecuación de Vlasov se reduce a:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + a \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (3)$$

Siendo:

$$a = \frac{q}{m} E(t, x) \quad (4)$$

En la aproximación electrostática, el campo eléctrico auto generado se obtiene por medio de la ecuación de Poisson:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{\rho(t, x)}{\epsilon_0} \quad (5)$$

Donde $\rho(t, x)$ es la densidad de carga, y el potencial eléctrico $\phi(t, x)$ se define a partir del campo eléctrico de la siguiente manera:

$$E(t, x) = -\frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (6)$$

Para determinar las densidades de carga de cada especie, las funciones de distribución correspondientes son integradas sobre el espacio de velocidades. La densidad de carga a introducir en la ecuación (5) será la sumatoria de las densidades de cada especie, es decir:

$$\rho(t, x) = \sum \rho_s(t, x) \quad (7)$$

$$\rho_s(t, x) = q_s \int_{-\infty}^{\infty} f_s(t, x, v) dv \quad (8)$$

2.2. La técnica de splitting

La ecuación de Vlasov (3) es una ecuación advectiva en dos dimensiones x y v , es decir, que se puede pensar como una ecuación que propaga los valores de la función de distribución sobre un plano (el plano de fases). La técnica de splitting, aplicada a este caso particular, consiste en descomponer la evolución de la función de distribución en dos advecciones separadas no simultáneas, una en la dirección de x y otra en la dirección de v . La primera etapa se escribe:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (9)$$

con v constante, y la segunda es:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + a(t, x) \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (10)$$

con x constante. La gran ventaja que proporciona esta técnica al aplicarse a la ecuación de Vlasov no relativista y sin campos magnéticos es que, el campo de advección en x , o sea v , no depende de x (no olvidar que x y v son coordenadas independientes), y que el campo de advección en v , o sea $a(t, x)$, no depende de v . La razón por la cual esto último es cierto no es tan obvia, ya que el campo eléctrico se obtiene a partir de tomar momentos de la función de distribución, la cual sí depende de v . La explicación es que, al integrar la ecuación (10) respecto de v , se obtiene que $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$. Es decir, que avanzar en el tiempo esta ecuación no modifica la densidad de carga (consecuentemente tampoco el campo eléctrico), a pesar de modificar los valores de f .

3. ESQUEMAS NUMÉRICOS

3.1. Esquemas de diferencias finitas

Los métodos de diferencias finitas se basan en aproximar, en cada nodo y en cada paso de tiempo, las derivadas que aparecen en las ecuaciones diferenciales mediante fórmulas de diferencias finitas. Antes de describir los esquemas, resulta conveniente introducir cierta nomenclatura útil. Todas las mallas que se usan en este trabajo son fijas y uniformes, siendo Δx y Δv , los espaciamientos entre nodos en la dirección espacial y de velocidad, respectivamente. Sea $f_{i,k}^n$ la aproximación numérica de $f(t, x, v)$ en el punto (x_i, v_k) , donde $x_i = i\Delta x$ y $v_k = k\Delta v$, y en el instante de tiempo $t^n = n\Delta t$.

3.1.1. Lax-Wendroff (2D de una etapa)

Su derivación se basa en expandir $f(t, x, v)$ en series de Taylor en t , y conservar los términos de hasta segundo orden. Luego, las derivadas temporales se escriben en función de derivadas espaciales usando la ecuación de Vlasov. El esquema resultante es:

$$\begin{aligned} f_{i,k}^{n+1} &= f_{i,k}^n - \Delta t v_k \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n - \Delta t a_i^n \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^n \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} v_k^2 \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^n + \frac{\Delta t^2}{2} [a^2]_i^n \left[\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right]_{i,k}^n \\ &+ \Delta t^2 v_k a_i^n \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial v} \right]_{i,k}^n - \left[\frac{\partial a}{\partial t} \right]_i^n \frac{\Delta t^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^n \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} v_k \left[\frac{\partial a}{\partial x} \right]_i^n \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^n + \frac{\Delta t^2}{2} a_i^n \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n \end{aligned} \quad (11)$$

Donde las derivadas espaciales, primeras y segundas, se aproximan usando diferencias centradas de segundo orden:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n &= \frac{f_{i+1,k}^n - f_{i-1,k}^n}{2\Delta x} \\ \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^n &= \frac{f_{i+1,k}^n - 2f_{i,k}^n + f_{i-1,k}^n}{\Delta x^2} \\ \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial v} \right]_{i,k}^n &= \frac{f_{i+1,k+1}^n - f_{i+1,k-1}^n + f_{i-1,k-1}^n - f_{i-1,k+1}^n}{4\Delta x \Delta v} \end{aligned} \quad (12)$$

Las derivadas de $f(t, x, v)$ respecto de v se escriben análogamente. La derivada espacial de $a(t, x)$ se obtiene usando la ecuación de Gauss para el campo eléctrico, equivalente a la ecuación de Poisson (5):

$$\left[\frac{\partial a}{\partial x} \right]_i^n = \frac{q}{m} \left[\frac{\partial E}{\partial x} \right]_i^n = \frac{q}{m} \frac{\rho_i^n}{\epsilon_0} \quad (13)$$

3.1.2. Lax-Wendroff (MacCormack predictor-corrector)

Se trata de la variante más simple de implementar del método de Lax-Wendroff, y consiste en dos etapas. En la primera, se estima el valor de $f(t^{n+1}, x, v)$ aproximando las derivadas espaciales con diferencias finitas hacia adelante de primer orden, y en la segunda, se usa el valor estimado para corregir $f(t^{n+1}, x, v)$ pero usando, esta vez, diferencias finitas hacia atrás.

a. Predictor:

$$f_{i,k}^* = f_{i,k}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_k (f_{i+1,k}^n - f_{i,k}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta v} a_i^n (f_{i,k+1}^n - f_{i,k}^n) \quad (14)$$

b. Corrector

$$f_{i,k}^{n+1} = \frac{1}{2} (f_{i,k}^n + f_{i,k}^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} v_k (f_{i,k}^* - f_{i-1,k}^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta v} a_i^* (f_{i,k}^* - f_{i,k-1}^*) \quad (15)$$

Donde a_i^* se calcula resolviendo la ecuación de Poisson entre ambas etapas a partir del valor estimado $f_{i,k}^*$. Alternativamente, se pueden usar diferencias finitas hacia atrás en el predictor, y hacia adelante en el corrector.

3.1.3. Lax-Wendroff (con splitting)

Se aplica el esquema de Lax-Wendroff unidimensional a las ecuaciones separadas según el splitting de Strang:

$$\begin{aligned} f_{i,k}^* &= f_{i,k}^n - \frac{\Delta t}{2} v_k \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n + \frac{\Delta t^2}{8} v_k^2 \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^n \\ f_{i,k}^{**} &= f_{i,k}^* - \Delta t a_i^* \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^* + \frac{\Delta t^2}{2} [a^2]_i^* \left[\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right]_{i,k}^* \\ f_{i,k}^{n+1} &= f_{i,k}^{**} - \frac{\Delta t}{2} v_k \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^{**} + \frac{\Delta t^2}{8} v_k^2 \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^{**} \end{aligned} \quad (16)$$

La ventaja que tiene esta formulación por sobre la bidimensional completa (11), es que no aparece ninguno de los términos cruzados. La desventaja es que introduce el error intrínseco al splitting. Las derivadas espaciales en la ecuación (16) se calculan de acuerdo con las fórmulas (12).

3.2. Esquemas semi-Lagrangianos advectivos

Aprovechando el hecho de que los valores de $f(t, x, v)$ se conservan a lo largo de las curvas características, estos métodos actualizan el valor de la función de distribución en cada nodo siguiendo las características un paso de tiempo hacia atrás.

Determinación del origen de las características:

La función de distribución es constante a lo largo de las curvas características de la ecuación de Vlasov, esto es:

$$f(t^{n+1}, x, v) = f[t^n, X(t^n; t^{n+1}, x, v), V(t^n; t^{n+1}, x, v)] \quad (17)$$

Donde $X(t^n; t^{n+1}, x, v)$ y $V(t^n; t^{n+1}, x, v)$ son las soluciones del sistema de ecuaciones diferenciales que define a las curvas características de la ecuación de Vlasov. La aproximación electrostática en coordenadas cartesianas, junto con la técnica de splitting, simplifican mucho el cómputo del origen de las características, el cual puede hacerse explícitamente en cada paso de tiempo de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} X(t^n; t^{n+1}, x, v) &= x - v\Delta t \\ V(t^n; t^{n+1}, x, v) &= v - a(t^*, x)\Delta t \end{aligned} \quad (18)$$

El valor de $a(t^*, x)$ debe ser elegido adecuadamente para que la solución sea consistente de cierto orden en el tiempo. Separando la ecuación de Vlasov según el splitting de Strang, el algoritmo para propagar f desde el tiempo t^n hasta el t^{n+1} se escribe:

$$\begin{aligned} f_{i,k}^* &= f^n\left(x_i - v_k \frac{\Delta t}{2}, v_k\right) \\ f_{i,k}^{**} &= f^*(x_i, v_k - a^*(x_i)\Delta t) \\ f_{i,k}^{n+1} &= f^{**}\left(x_i - v_k \frac{\Delta t}{2}, v_k\right) \end{aligned} \quad (19)$$

Como se dijo anteriormente, la densidad $\rho(t, x)$, y por lo tanto $a(t, x)$, no se ven afectadas por el avance de la segunda de las ecuaciones (19). Entonces, $a^*(x_i)$ se puede aproximar por el valor de $a(t, x)$ computado a partir de la integración en v de $f^*(t, x, v)$. Notar que cada una de las tres etapas que componen un paso de tiempo requiere de una interpolación unidimensional.

Interpolación:

Si bien estos métodos no están sujetos a una condición de tipo CFL como los de diferencias finitas, es conveniente, pero no necesario, restringir el paso de tiempo de manera tal que:

$$\begin{aligned} |v_{max}| \Delta t &\leq \Delta x \\ |a_{max}| \Delta t &\leq \Delta v \end{aligned} \quad (20)$$

En este caso, por ejemplo, el punto $X(t^n; t^{n+1}, x_i, v_k) = x_i - v_k \Delta t$ pertenece al intervalo:

$$\begin{aligned} [x_{i-1}, x_i] & \quad \text{si} \quad v_k > 0 \\ [x_i, x_{i+1}] & \quad \text{si} \quad v_k < 0 \end{aligned} \quad (21)$$

3.2.1. Interpolación cúbica en forma de Lagrange

Dados $n + 1$ conjuntos de valores (x_i, f_i) , existe un único polinomio L_n de grado n que satisface las $n + 1$ condiciones de interpolación. Si el punto a interpolar es $X(t^n; t^{n+1}, x_i, v_k)$ y pertenece al intervalo $[x_j, x_{j+1}]$, entonces el polinomio interpolante de grado tres depende de los valores en los puntos:

$$\{x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x_{j+2}\} \quad (22)$$

y se puede expresar en la forma de Lagrange como:

$$L_3(x) = \sum_{i=j-1}^{j+2} f_i l_i(x) \quad (23)$$

donde las funciones $l_i(x)$ son los polinomios de base de Lagrange cúbicos definidos sobre los puntos (22). La desventaja de este tipo de interpolación es que, en general, no se obtienen derivadas continuas de un intervalo a otro.

3.2.2. Interpolación cúbica en forma de Hermite

La función interpolante en el intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ se puede escribir como:

$$\begin{aligned} H_3(x) &= h_{00}(\xi) f_i + h_{01}(\xi) f_{i+1} \\ &+ \Delta x [h_{10}(\xi) f'_i + h_{11}(\xi) f'_{i+1}] \end{aligned} \quad (24)$$

siendo:

$$\xi = \frac{x - x_i}{\Delta x} \quad (25)$$

y las funciones:

$$\begin{aligned} h_{00}(\xi) &= 2\xi^3 - 3\xi^2 + 1 \\ h_{01}(\xi) &= -2\xi^3 + 3\xi^2 \\ h_{10}(\xi) &= \xi^3 - 2\xi^2 + \xi \\ h_{11}(\xi) &= \xi^3 - \xi^2 \end{aligned} \quad (26)$$

Encontrar este polinomio en cada intervalo, genera una función definida por partes que es continua y tiene primera derivada continua. Como no se tiene información sobre las derivadas de la función de distribución, estas son aproximadas por diferencias finitas centradas, de segundo orden.

3.2.3. Interpolación con splines cúbicos

Los splines son funciones polinómicas definidas por tramos que conservan cierto grado de suavidad global. De hecho, si el polinomio interpolante en cada intervalo es de grado d , entonces la interpolación con splines brinda $d - 1$ derivadas continuas. Es decir, que si se usan splines

cúbicos, entonces se obtienen interpolantes con derivada segunda continua de un intervalo a otro. La manera tradicional de determinar los splines, es escribir la función interpolante como una combinación lineal de B-splines con coeficientes a determinar a partir de las condiciones de interpolación y de borde. No obstante, en el caso de los splines cúbicos, es posible expresar al polinomio interpolante en la forma de Hermite (24), pero con la siguiente condición para las derivadas primeras:

$$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} = \frac{3}{\Delta x} (f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (27)$$

Si el número de nodos es $n + 1$, la ecuación (27) representa un sistema de $n - 1$ ecuaciones lineales con $n + 1$ derivadas incógnitas. Son necesarias dos condiciones de borde extras, de las que se emplean dos tipos en este trabajo: periódicas ($f'_0 = f'_n$) y naturales ($f''_0 = f''_n = 0$).

3.3. Esquemas semi-Lagrangianos conservativos (volúmenes finitos)

Hasta ahora, las soluciones numéricas que se buscaban eran valores puntuales de la función de distribución en puntos fijos del dominio llamados nodos. En cambio, los esquemas conservativos basados en volúmenes finitos buscan valores promedio de la función de distribución $\bar{f}(t, x, v)$ sobre pequeños intervalos llamados celdas. Si se define al intervalo o celda como:

$$I_i = \left[x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]$$

es conveniente introducir la siguiente notación:

$$f_i^n = \bar{f}(t^n, x_i, v) = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} f(t^n, x, v) dx \quad (28)$$

La conservación de la función de distribución a lo largo de las curvas características permite transformar la integral sobre un intervalo I , en una integral sobre otro intervalo que, en el instante de tiempo s , contiene las mismas partículas que en el tiempo t estaban en I . Esto es:

$$\begin{aligned} \int_I f(t, x, v) dx &= \int_I f[s, X(s; t, x, v), v] dx \\ &= \int_{X(s; t, I, v)} f(s, x, v) dx \end{aligned} \quad (29)$$

Luego, aplicando esta transformación (29) entre el tiempo t y el tiempo $t + \Delta t$, y usando la notación 28, se tiene:

$$\int_{I_i} f(t^{n+1}, x, v) dx = \int_{X(t^n; t^{n+1}, I_i, v)} f(t^n, x, v) dx \quad (30)$$

$$f_i^{n+1} \Delta x = \int_{X(t^n; t^{n+1}, x_i - \frac{\Delta x}{2}, v)}^{X(t^n; t^{n+1}, x_i + \frac{\Delta x}{2}, v)} f(t^n, x, v) dx \quad (31)$$

Es posible reescribir convenientemente esta ecuación como:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{1}{\Delta x} \left[\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n - \Phi_{i-\frac{1}{2}}^n \right] \quad (32)$$

Donde los $\Phi_{i\pm\frac{1}{2}}^n$ representan a los flujos salientes y entrantes en el intervalo I_i a través de sus contornos en el lapso de tiempo entre t y $t + \Delta t$. Lo notable es que en lugar de determinar los flujos como integrales en el tiempo, las curvas características hacen posible calcularlos por medio de integrales en el espacio.

3.3.1. Reconstrucción lineal centrada

Se denota como $f_h(t^n, x, v)$ a la reconstrucción polinómica de $f(t^n, x, v)$. La reconstrucción lineal centrada da como resultado el método FBM de Fijalkow (1999), y se escribe:

$$f_h(t^n, x, v) = f_i^n + \frac{(x - x_i)}{2\Delta x} [f_{i+1}^n - f_{i-1}^n] \quad (33)$$

$$\text{si } x \in I_i = \left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}} \right]$$

Flujos si $v > 0$:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n = v\Delta t \left[f_i^n + \frac{1}{4} \left(1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) \right] \quad (34)$$

Flujos si $v < 0$:

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}^n = v\Delta t \left[f_i^n - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) \right] \quad (35)$$

Notar que, independientemente del signo de la velocidad, el flujo a través de una interfaz entre dos celdas será entrante en una de las celdas y saliente en la otra. Es esta propiedad, la que proporciona la conservación de las partículas en las simulaciones de Vlasov. Expresiones completamente análogas se pueden derivar para la reconstrucción y los flujos en el espacio de velocidades.

3.3.2. Reconstrucción con primitiva cuadrática

Sea $F(t, x)$ una función primitiva de la función de distribución, esto es:

$$f_i^n \Delta x = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(t^n, x, v) dx = F(t^n, x_{i+\frac{1}{2}}) - F(t^n, x_{i-\frac{1}{2}}) \quad (36)$$

Se realiza una reconstrucción polinómica de segundo grado de $F(t, x)$ en la forma de Lagrange usando los puntos:

$$\begin{cases} \left\{ x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{3}{2}} \right\} & \text{si } v > 0 \\ \left\{ x_{i-\frac{3}{2}}, x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}} \right\} & \text{si } v < 0 \end{cases} \quad (37)$$

Derivar la reconstrucción obtenida para la función primitiva, respecto de x , brinda la aproximación buscada para $f(t^n, x, v)$ dentro del intervalo $\left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}} \right]$:

$$\begin{aligned} f_h(t^n, x, v) &= f_i^n + \frac{(x-x_i)}{\Delta x} (f_{i+1}^n - f_i^n) & \text{si } v > 0 \\ f_h(t^n, x, v) &= f_i^n + \frac{(x-x_{i-1})}{\Delta x} (f_i^n - f_{i-1}^n) & \text{si } v < 0 \end{aligned} \quad (38)$$

Si $v > 0$, se define:

$$\alpha_i = x_{i+\frac{1}{2}} - X(t^n; t^{n+1}, x_{i+\frac{1}{2}}) \quad (39)$$

Recordar que el paso de tiempo se restringe para que siempre se cumpla $v\Delta t < \Delta x$, por lo tanto, también se cumple $0 < \alpha_i < \Delta x$. El flujo en este caso es:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n = \alpha_i \left[f_i^n + \frac{\epsilon_i^+}{2} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) (f_{i+1}^n - f_i^n) \right] \quad (40)$$

Si $v < 0$, se define:

$$\alpha_i = x_{i-\frac{1}{2}} - X(t^n; t^{n+1}, x_{i-\frac{1}{2}}) \quad (41)$$

Esta vez, como $v < 0$, se cumple $0 < -\alpha_i < \Delta x$, y el flujo es:

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}^n = \alpha_i \left[f_i^n - \frac{\epsilon_i^-}{2} \left(1 + \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) (f_i^n - f_{i-1}^n) \right] \quad (42)$$

Si la reconstrucción polinómica de la función primitiva se realiza empleando polinomios cúbicos en la forma de Lagrange, resulta el método PFC de [Filbet et al. \(2001\)](#).

4. PROBLEMA DE PRUEBA

4.1. Amortiguamiento lineal de Landau

Se denomina amortiguamiento de Landau, a la disipación no colisional de ondas electrostáticas longitudinales, u ondas de Langmuir, en un plasma. Curiosamente, la existencia de este fenómeno fue probada experimentalmente casi dos décadas después de que fuera predicho teóricamente por Lev Landau. La raíz del amortiguamiento es una interacción onda-partículas, en la que la onda electrostática con velocidad de fase V_{ph} intercambia energía con las partículas resonantes, es decir, con aquellas cuya velocidad es próxima a V_{ph} .

La tasa de amortiguamiento teórica γ para una distribución de electrones sin perturbar de Maxwell-Boltzmann se calcula como:

$$\gamma = -\sqrt{\pi} \frac{\omega_{pe}}{2\sqrt{2}k^3\lambda_{De}^3} \exp\left(-\frac{1}{2k^2\lambda_{De}^2} - \frac{3}{2}\right) \quad (43)$$

4.2. Parámetros de la simulación numérica

Las condiciones iniciales del plasma consisten de una distribución de Maxwell-Boltzmann para los iones, los cuales se consideran estacionarios, y una distribución perturbada para los electrones, dada por la expresión siguiente:

$$f_e(0, x, v) = (1 + \alpha \cos(kx)) f_0(v) \quad (44)$$

Siendo:

$$f_0(v) = n_0 \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k_B T_e}} \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2k_B T_e}\right) \quad (45)$$

Los parámetros característicos del estado inicial del plasma son: temperatura de los electrones $T_e = 10^5 K$, y densidad de electrones $n_0 = 10^{10} m^{-3}$. La amplitud de la perturbación es $\alpha = 0,01$, y la constante de la onda o *wavenumber* es $k = \frac{0,5}{\lambda_{De}}$. El dominio numérico está dado por $x \in [0, L]$ en el espacio físico, y $v \in [-v_{max}, v_{max}]$ en el espacio de velocidades. Donde los límites son $L = 4\pi\lambda_{De}$ y $v_{max} = 8V_{th}$.

Las condiciones de contorno que se usan en todas las simulaciones son periódicas en el espacio físico y de Dirichlet en el de velocidades:

$$f(t, x_0, v) = f(t, x_n, v) \quad (46)$$

$$f(t, x, -v_{max}) = f(t, x, v_{max}) = 0 \quad (47)$$

Para que la segunda condición de borde (47) sea físicamente coherente, los límites del dominio de velocidad (v_{max}) deben elegirse lo suficientemente grandes como para que la función de distribución tienda a cero al acercarse a ellos.

La resolución de la grilla numérica está dada por la cantidad de nodos en la dirección de x : $N_x = 100$, y en la dirección de v : $N_v = 800$. Finalmente, el paso de tiempo elegido es: $\Delta t = 0,9 \frac{\Delta x}{v_{max}}$. Si bien los esquemas semi-Lagrangianos no están restringidos por una condición de tipo CFL, los de diferencias finitas sí, y es por ello que se elige este paso de tiempo para todas las simulaciones.

5. RESULTADOS

En la Figura 1 se muestra la evolución temporal del logaritmo de la norma L_2 del campo eléctrico obtenida con los distintos esquemas para el caso del amortiguamiento lineal de Landau, descrito en la sección anterior. La línea de puntos representa a la predicción teórica de la tasa de decremento en la amplitud de las oscilaciones calculada según la ecuación (43). Se puede apreciar a partir de la figura, que el amortiguamiento obtenido con todos los métodos numéricos mostrados está en muy buena concordancia con el analítico.

La Figura 2 representa la evolución de la entropía cinética S_k del sistema de partículas. Los esquemas conservativos son los que producen un aumento más pronunciado de la entropía, sin embargo, este crecimiento es pequeño en todos los casos. Por su parte, la variación en el tiempo de la energía total ε_{total} es graficada en la Figura 3. En general, puede apreciarse que con la resolución usada para las grillas, todos los esquemas presentan resultados similares y muy consistentes.

En las Figuras 4 y 5 se muestra la evolución de las normas L_1 y L_2 de la función de distribución, respectivamente. La preservación de la norma $\|f\|_1$ es representativa de la conservación de las partículas, por este motivo, es esperable que los esquemas conservativos presenten las mejores características en este aspecto. Los valores graficados en las Figuras 2 - 5 no valores absolutos, sino las variaciones normalizadas respecto de la condición inicial. La cantidad peor conservada es la energía total, no obstante, su variación se mantiene acotada dentro del 0,0001 % del valor inicial. Esto sugiere que todos los códigos presentan notables características para simular este problema particular.

6. CONCLUSIONES

En este trabajo se presentaron y pusieron a prueba una serie de métodos Eulerianos para la simulación numérica del sistema Vlasov-Poisson, incluidos esquemas de diferencias finitas de segundo orden, semi-Lagrangianos advectivos y conservativos. En los dos últimos fue aplicada la técnica de splitting dimensional para separar la ecuación de Vlasov bidimensional (x, v) en dos advecciones a coeficientes constantes.

El desempeño y precisión de los códigos fue evaluado mediante el problema clásico de prueba del amortiguamiento lineal de Landau. Este problema es muy útil para probar la habilidad de los códigos de Vlasov para simular problemas lineales, pero no es adecuado para valorar la precisión y estabilidad ante problemas no lineales.

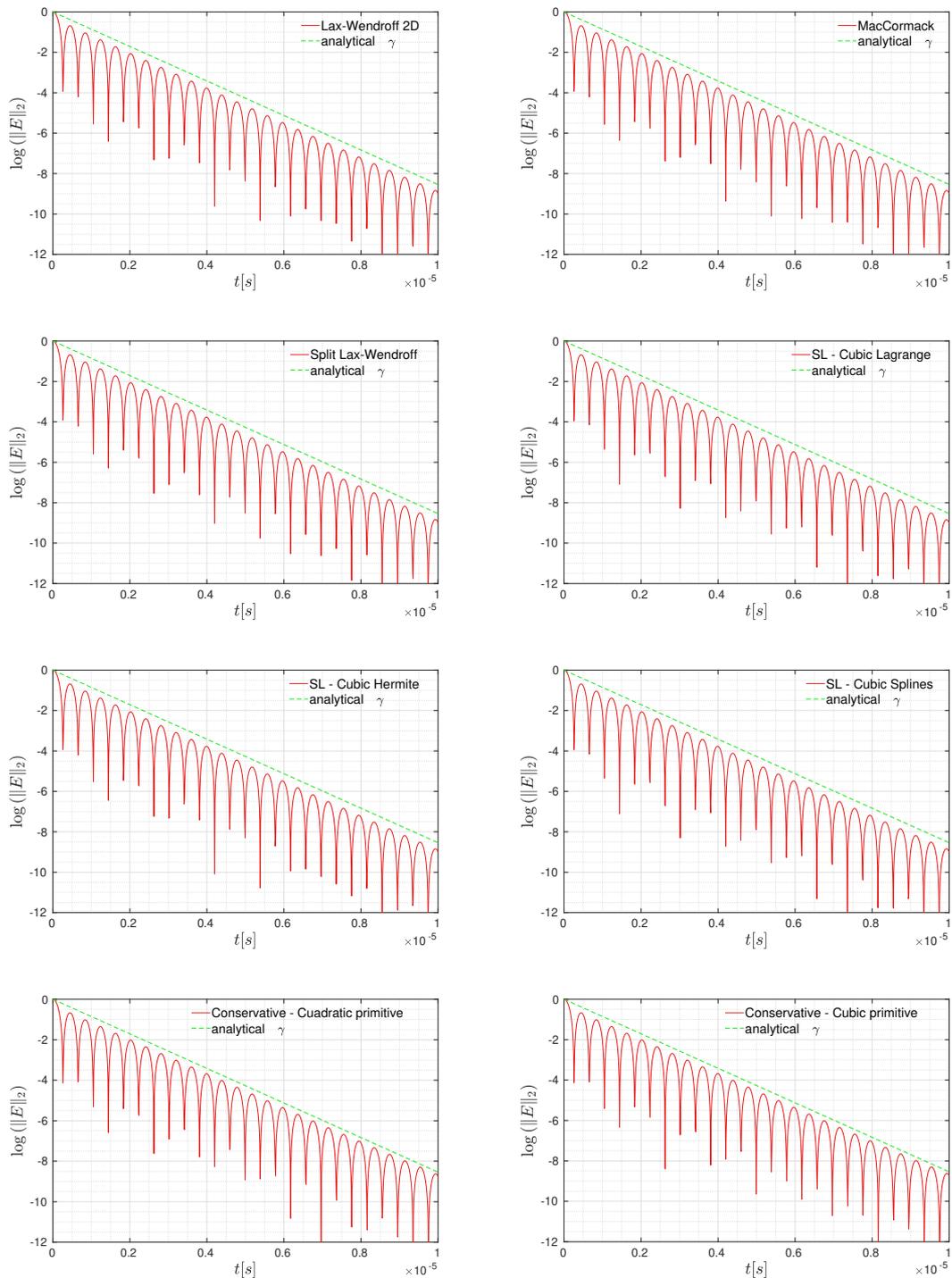


Figura 1: Evolución temporal de la norma L_2 del campo eléctrico en el amortiguamiento lineal de Landau. Comparación entre los distintos métodos numéricos (línea continua) y la predicción analítica (línea de trazos).

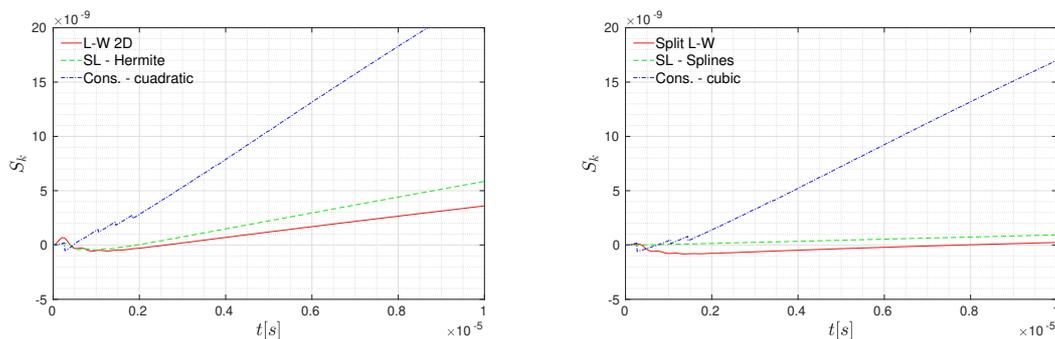


Figura 2: Evolución temporal de la entropía cinética. Comparación entre esquemas.

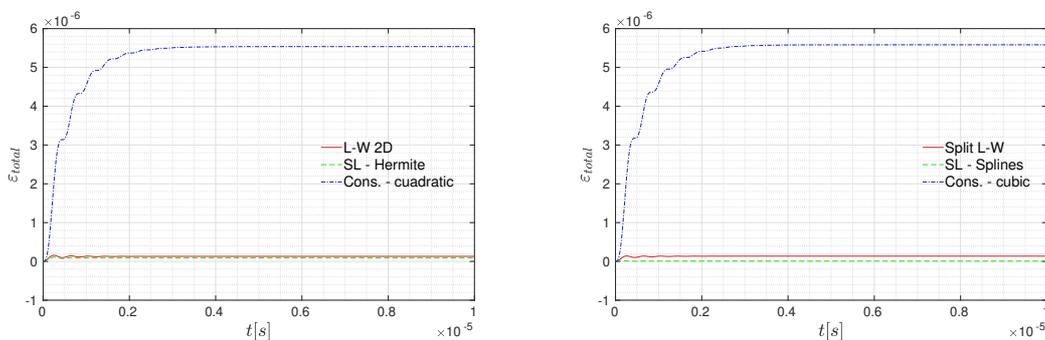


Figura 3: Evolución temporal de la energía total. Comparación entre esquemas.

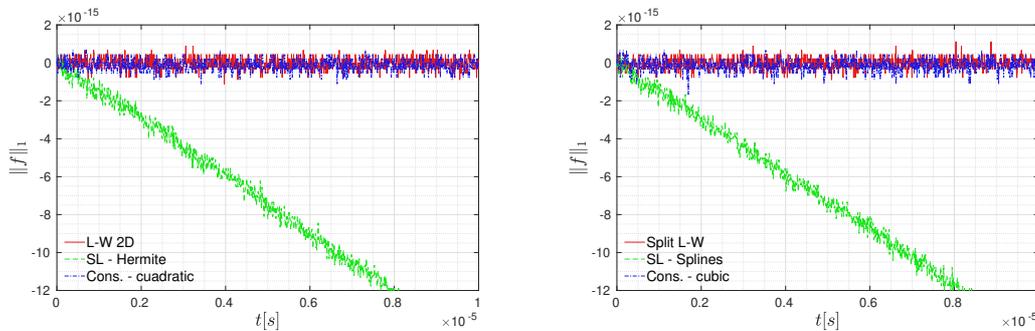


Figura 4: Evolución temporal de la norma L_1 de f . Comparación entre esquemas.

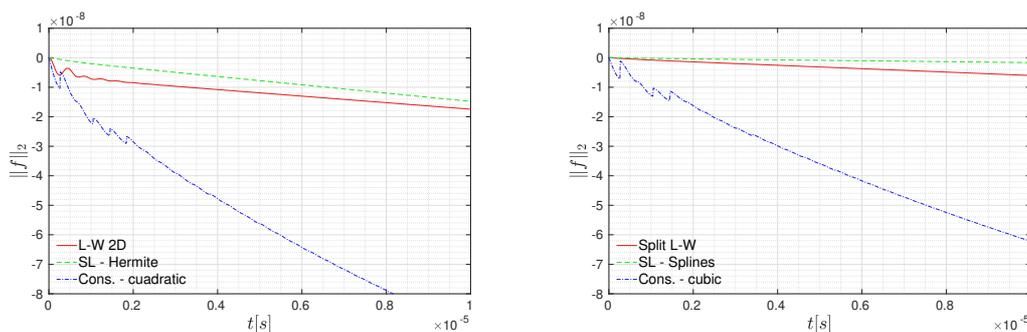


Figura 5: Evolución temporal de la norma L_2 de f . Comparación entre esquemas.

A partir de los resultados obtenidos, la pregunta de cuáles métodos son mejores que otros no tiene una respuesta clara. Los esquemas de diferencias finitas son los más simples conceptualmente y los más fáciles de implementar. En cuanto a la precisión, todos los códigos fueron capaces de reproducir la tasa de amortiguamiento teórica con exactitud. La evolución de las cantidades invariantes del sistema Vlasov-Poisson sugiere que los esquemas conservativos son los más disipativos, lo cual podría significar una ventaja en el tratamiento de problemas no lineales. Los semi-Lagrangianos advectivos son los únicos que no conservan la cantidad de partículas con la precisión de la computadora, sin embargo, son los que muestran mejores características de preservación de la energía total y la norma L_2 de f , especialmente cuando se usan splines cúbicos como funciones de interpolación.

Una forma de extender la comparación realizada en este trabajo será la simulación de otros problemas de prueba fuertemente no lineales como el amortiguamiento de Landau no lineal, la inestabilidad de dos corrientes y la inestabilidad *bump-on-tail*.

REFERENCIAS

- Banks J.W. y Hittinger J.A.F. A New Class of Nonlinear Finite-Volume Methods for Vlasov Simulation. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 38(9):2198–2207, 2010. ISSN 0093-3813. doi:10.1109/TPS.2010.2056937.
- Birdsall C.K. y Langdon A.B. *Plasma physics via computer simulation*. Series in plasma physics. New York [u.a.] Taylor & Francis, 2005. ISBN 978-0-7503-1025-3. OCLC: 255024486.
- Cheng C. y Knorr G. The integration of the vlasov equation in configuration space. *Journal of Computational Physics*, 22(3):330–351, 1976. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(76)90053-X.
- Feix M.R. y Bertrand P. A Universal Model: The Vlasov Equation. *Transport Theory and Statistical Physics*, 34(1-2):7–62, 2005. ISSN 0041-1450, 1532-2424. doi:10.1080/00411450500253703.
- Fijalkow E. A numerical solution to the Vlasov equation. *Computer Physics Communications*, 116(2-3):319–328, 1999. ISSN 00104655. doi:10.1016/S0010-4655(98)00146-5.
- Filbet F. y Sonnendrücker E. Comparison of Eulerian Vlasov solvers. *Computer Physics Communications*, 150(3):247–266, 2003. ISSN 00104655. doi:10.1016/S0010-4655(02)00694-X.
- Filbet F., Sonnendrücker E., y Bertrand P. Conservative Numerical Schemes for the Vlasov Equation. *Journal of Computational Physics*, 172(1):166–187, 2001. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.2001.6818.
- Hockney R.W. y Eastwood J.W. *Computer simulation using particles*. A. Hilger, Bristol [England] ; Philadelphia, special student ed edición, 1988. ISBN 978-0-85274-392-8.
- Sonnendrücker E., Roche J., Bertrand P., y Ghizzo A. The Semi-Lagrangian Method for the Numerical Resolution of the Vlasov Equation. *Journal of Computational Physics*, 149(2):201–220, 1999. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1998.6148.
- Umeda T., Ashour-Abdalla M., y Schriver D. Comparison of numerical interpolation schemes for one-dimensional electrostatic Vlasov code. *Journal of Plasma Physics*, 72(06):1057, 2006. ISSN 0022-3778, 1469-7807. doi:10.1017/S0022377806005228.
- Vogman G., Shumlak U., y Colella P. Conservative fourth-order finite-volume Vlasov–Poisson solver for axisymmetric plasmas in cylindrical (r,v,v) phase space coordinates. *Journal of Computational Physics*, 373:877–899, 2018. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2018.07.029.