

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA
Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

**SIMULACIONES NUMÉRICAS DE LA
CINÉTICA DE PLASMAS USANDO EL
MODELO VLASOV-POISSON**

Tesis presentada por

DENIS LORENZON

como requisito parcial para obtener el grado de

DOCTOR EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA

Director: SERGIO ELASKAR

19 de Marzo de 2020

Resumen

Se denomina plasma al estado de la materia compuesto por electrones libres, iones y átomos neutros, los cuales interactúan a distancia por medio de fuerzas electromagnéticas, exhibiendo un comportamiento colectivo que caracteriza a esta sustancia y la distingue de los demás fluidos y de otras formas de materia condensada. Una de las descripciones matemáticas más completas de los plasmas, de la cual es posible obtener resultados numéricos, es provista por la teoría cinética, donde el estado de cada especie es representado por una función escalar de probabilidad definida en el espacio de fases posición-velocidad.

La evolución temporal de la función de distribución de cada especie es descrita por la ecuación de Boltzmann junto con un modelo electromagnético apropiado como el dado por las ecuaciones de Maxwell. En el límite donde los efectos colectivos son dominantes sobre las colisiones binarias entre partículas, la ecuación de Boltzmann se reduce a la ecuación de Vlasov. Si los campos magnéticos auto generados y externos son despreciables, entonces la fuerza de Lorentz se debe sólo al campo eléctrico, el cual puede calcularse a partir de la ecuación de Poisson en casos no relativistas.

Actualmente, existen dos clases de métodos numéricos para la simulación de la cinética de plasmas: los métodos de partículas (PIC) y los métodos Eulerianos (continuos o basados en grillas). Este trabajo está enfocado únicamente en los segundos, los cuales discretizan la función de distribución sobre una malla en el espacio de fases, y avanzan en el tiempo la ecuación de Vlasov directamente. Tienen la ventaja, en comparación con los PIC, de alcanzar alta precisión con bajo ruido, a expensas de un costo computacional mayor.

Las ecuaciones que gobiernan la cinética de plasmas son descritas en detalle. Se introduce la derivación de la ecuación de Vlasov en su forma advectiva o de Liouville, y en su forma conservativa o de ley de conservación, tanto fuerte como débil. Ambas formulaciones son expresadas respecto de un sistema de coordenadas cartesianas y respecto de un sistema cilíndrico. Se destaca que este sistema de coordenadas cilíndricas no es el clásico (r, θ, z) , sino que se trata de un sistema de coordenadas en un espacio de 6 dimensiones, cuya base no sólo es no global sino también no ortogonal, y presenta la dificultad adicional de que los elementos de volumen y superficie varían con la coordenada radial.

Los métodos numéricos más ampliamente usados en la literatura científica para la simulación de la cinética de plasmas fueron estudiados e implementados computacional-

mente. Se presentan y describen los esquemas basados en diferencias finitas de segundo orden, los semi-Lagrangianos advectivos con distintos tipos de interpolación, los semi-Lagrangianos conservativos con reconstrucciones de distintos órdenes, y los más recientes basados en volúmenes finitos, los cuales combinan reconstrucciones polinómicas de alto orden con un integrador temporal explícito de tipo Runge-Kutta.

Con el objetivo de evaluar y comparar los distintos métodos implementados, se lleva a cabo una serie de benchmarks clásicos, los cuales son usados rutinariamente para verificar soluciones numéricas del sistema Vlasov-Poisson bidimensional. En los casos más simples, donde el análisis lineal provee soluciones semi analíticas aproximadas, los resultados numéricos obtenidos son contrastados contra las predicciones teóricas. Adicionalmente, se hace una breve comparación de performance entre los distintos códigos.

De entre todos los métodos estudiados, los basados en diferencias finitas y en volúmenes finitos son implementados en coordenadas cilíndricas para el tratamiento de problemas axialmente simétricos. Como primera prueba numérica en geometrías cilíndricas, se evalúa la capacidad de los esquemas para preservar en el tiempo una función de distribución en equilibrio termodinámico y uniforme en el espacio.

Finalmente, se simula el problema de una sonda de Langmuir cilíndrica inmersa en el plasma, cuyo potencial es variado abruptamente desde cero hasta un valor positivo relativamente grande. Tanto los electrones como los iones reaccionan ante esta polarización oscilando hasta alcanzar un nuevo estado estacionario. La importancia que tiene la correcta simulación de este caso particular reside en sus aplicaciones prácticas, como la caracterización de plasmas de laboratorio o el diseño de amarras espaciales electrodinámicas.

Para cada caso de pruebas estudiado, se describe y compara el comportamiento de los métodos numéricos implementados y se extraen conclusiones sobre las fortalezas y debilidades de cada uno.

Abstract

Plasma is the state of matter composed of free electrons, ions and neutral atoms, which interact remotely through electromagnetic forces, exhibiting a collective behavior that characterizes this substance and distinguishes it from other fluids and forms of condensed matter. One of the most complete mathematical descriptions of plasmas, from which it is possible to obtain numerical results, is provided by the kinetic theory. In this context, each species is represented by a scalar probability distribution function defined in the position-velocity phase space.

The temporal evolution of the distribution function for each species is described by the Boltzmann equation together with an appropriate electromagnetic model, such as that given by Maxwell's equations. At the limit where collective effects are dominant over binary collisions between particles, the Boltzmann equation reduces to the Vlasov equation. If auto-generated and external magnetic fields are negligible, then, the Lorentz's force is due to the electric field only, which can be calculated from the Poisson equation in the non-relativistic case.

Currently, there are two families of numerical methods for the simulation of the plasma kinetic model: particle methods (PIC) and Eulerian methods (continuum or grid based). This work is focused on the latter only, which discretizes the distribution function on a phase-space grid, and advance the Vlasov equation in time directly. They have the advantage, in comparison to PIC ones, of achieving high precision with low numerical noise, at the expense of a higher computational cost.

The equations that govern plasma kinetics are described in detail. The derivation of the Vlasov equation is introduced in its advective or Liouville form, and in its conservative or conservation law form. Both formulations are expressed in a Cartesian coordinate system and with respect to a cylindrical system. It is emphasized that this cylindrical coordinate system is not the classical (r, θ, z) , but it is rather a coordinate system in a 6-dimensional phase space, whose basis is not only non-global but also non-orthogonal, and it presents the additional difficulty that volume and surface elements vary with the radius.

The most widely used Eulerian numerical methods in the scientific literature for plasma kinetic simulation were studied and computationally implemented. Schemes based on second-order finite differences, advective semi-Lagrangian schemes with different types

of interpolation, conservative semi-Lagrangian schemes with reconstructions of different orders, and the most recent ones based on finite volumes, which combine high order polynomial reconstructions with an explicit Runge-Kutta time integration, are introduced and described.

To evaluate and compare the different implemented methods, several classic benchmarks are carried out. These numerical tests are routinely used to verify numerical solutions of the two-dimensional Vlasov-Poisson system. In the simplest cases, where linear analysis provides approximate semi-analytical solutions, the obtained numerical results are contrasted against theoretical predictions. Additionally, a brief performance comparison is made between the different codes.

Among all the methods studied, those based on finite differences and finite volumes are implemented in cylindrical coordinates for the treatment of axisymmetric problems. Two numerical tests are carried out in cylindrical geometries. First, the capability of the schemes to preserve over time an equilibrium distribution function uniform in space is evaluated.

Finally, it is simulated the problem of a cylindrical Langmuir probe immersed in the plasma, whose potential is abruptly varied from zero to a relatively large positive value. Both electrons and ions react to this polarization oscillating until they reach a new steady state. The importance of the correct simulation of this particular case lies in its practical applications, such as the characterization of laboratory plasmas or the design of electrodynamic space tethers.

For each of the studied tests, the behavior of the implemented numerical methods is described and compared, and conclusions are drawn regarding the strengths and weaknesses of each one.

Índice general

Resumen	3
Abstract	5
1. Objetivos y organización de la tesis	11
2. Introducción	15
2.1. ¿Qué es el Plasma?	15
2.1.1. Parámetros fundamentales	16
2.2. Modelado matemático de los plasmas	17
2.2.1. El modelo de n cuerpos	18
2.2.2. El modelo cinético	18
2.2.3. El modelo giro-cinético	18
2.2.4. El modelo fluido: MHD	19
2.2.5. El modelo de dos fluidos	19
2.3. Descripción cinética del plasma	19
2.4. Métodos numéricos para la ecuación de Vlasov	20
2.4.1. Métodos de partículas (PIC)	20
2.4.2. Métodos Eulerianos	21
2.4.3. PIC vs Eulerianos	23
2.4.4. Splitting dimensional	24
2.4.5. Filamentación	25
3. Ecuaciones de gobierno de la cinética de plasmas	27
3.1. Espacio de fases y función de distribución	27
3.2. Evolución de la función de distribución	28
3.2.1. Teorema de Liouville y ecuación de Boltzmann	29
3.2.2. La ecuación de Vlasov	31
3.2.3. Forma conservativa de la ecuación de Vlasov	31
3.2.4. Formulación en coordenadas cartesianas	33
3.2.5. Formulación en coordenadas cilíndricas	35

3.3.	El modelo electromagnético	42
3.3.1.	El sistema Vlasov-Maxwell	43
3.3.2.	El sistema Vlasov-Darwin	44
3.3.3.	El sistema Vlasov-cuasi-estático o Vlasov-Poiswell	45
3.3.4.	El sistema Vlasov-Poisson	46
3.3.5.	El sistema Vlasov-Ampere	47
3.4.	Propiedades de conservación del sistema Vlasov-Poisson	47
4.	Métodos numéricos para Vlasov-Poisson en coordenadas cartesianas	49
4.1.	Esquema para la ecuación de Poisson 1D	50
4.2.	La técnica de Splitting	52
4.3.	Integración temporal	54
4.3.1.	Métodos Runge-Kutta	55
4.3.2.	Métodos Adams-Bashforth	55
4.4.	Esquemas de diferencias finitas	56
4.4.1.	Lax-Friedrichs	57
4.4.2.	Lax-Friedrichs (con splitting)	57
4.4.3.	Lax-Wendroff (2D de una etapa)	58
4.4.4.	Lax-Wendroff (Richtmyer de dos etapas)	59
4.4.5.	Lax-Wendroff (MacCormack predictor-corrector)	59
4.4.6.	Lax-Wendroff (con splitting)	60
4.5.	Esquemas semi-Lagrangianos advectivos	61
4.5.1.	Interpolación cúbica en forma de Lagrange	63
4.5.2.	Interpolación cúbica en forma de Hermite	64
4.5.3.	Interpolación con splines cúbicos	65
4.6.	Esquemas semi-Lagrangianos conservativos	66
4.6.1.	Reconstrucción lineal centrada	68
4.6.2.	Reconstrucción con primitiva cuadrática	69
4.6.3.	Reconstrucción con primitiva cúbica	70
4.7.	Esquemas de volúmenes finitos	71
4.7.1.	Discretización espacial	72
4.7.2.	Aproximación de la integral del producto entre dos cantidades	74
4.7.3.	Interpolación polinómica unidimensional	75
4.7.4.	Cálculo de los flujos	76
5.	Pruebas numéricas en coordenadas cartesianas	79
5.1.	Amortiguamiento lineal de Landau	79
5.2.	Amortiguamiento no lineal de Landau	88
5.3.	Inestabilidad de dos corrientes	91

5.4. Inestabilidad Bump-on-tail	98
5.5. Una comparación rápida de performance	103
6. Métodos numéricos para Vlasov-Poisson en coordenadas cilíndricas	107
6.1. Esquema para la ecuación de Poisson 1D	108
6.2. Esquemas de diferencias finitas	111
6.2.1. Un esquema estable de primer orden	112
6.2.2. El esquema de Lax-Wendroff	113
6.3. Esquemas de volúmenes finitos	114
6.3.1. Discretización espacial	115
6.3.2. Aproximación de la integral del producto entre varias cantidades . .	119
6.3.3. Interpolación polinómica unidimensional	119
6.3.4. Cálculo de los flujos	122
7. Pruebas numéricas en coordenadas cilíndricas	127
7.1. Preservación de una función de distribución en equilibrio	128
7.2. Sonda de Langmuir cilíndrica	135
8. Conclusiones	145
8.1. Trabajos futuros	149
Bibliografía	151

Capítulo 1

Objetivos y organización de la tesis

La presente tesis surge a partir de la necesidad de hacer un estudio cinético de la captura de corriente y de la estructura del plasma en las inmediaciones de una sonda de Langmuir cilíndrica mediante códigos de Vlasov Eulerianos. Para ello, la Universidad Politécnica de Madrid (UPM) había desarrollado el programa Kilaps (Sánchez-Arriaga, 2013; Sánchez-Arriaga y Pastor-Moreno, 2014), el cual implementa un esquema de diferencias finitas de primer orden para resolver el sistema Vlasov-Poisson, y así obtener la evolución espacio-temporal de las distribuciones de electrones e iones positivos en las proximidades de la sonda. La propuesta del Dr. G. Sánchez Arriaga de la UPM era incorporar al programa Kilaps aquellos efectos físicos, normalmente ignorados en la literatura de sondas de Langmuir, que pudieran producir un impacto significativo en las actuaciones de la sonda. Algunos ejemplos de estos efectos eran: descripción completamente electrodinámica del plasma en vez de electrostática, consideración de campos magnéticos auto generados y externos, y movimiento relativo entre la sonda y el plasma.

Sin embargo, cuando se comenzó a estudiar el programa Kilaps y a obtener resultados a partir de éste (Lorenzon et al., 2016a,b), se advirtió que presentaba cierto número de debilidades numéricas, por ejemplo: la discretización en diferencias finitas de primer orden es excesivamente disipativa, la generación de oscilaciones espurias en las variables primarias, la aparición de valores negativos de la función de distribución, la falta de convergencia de las mallas con las resoluciones usadas, y la baja eficiencia de la paralelización del código implementada. Esto último fue comprobado posteriormente al escribir una versión secuencial del esquema, la cual era más rápida que la versión paralela ejecutada en 4 núcleos.

Por estos motivos, en lugar de incorporar efectos físicos al programa Kilaps, se consideró conveniente empezar una línea nueva de desarrollo de herramientas numéricas y códigos computacionales para la simulación de modelos cinéticos de plasma usando métodos Eulerianos. Esta tesis comprende una revisión exhaustiva de los métodos numéricos existentes en la bibliografía para la solución de la ecuación de Vlasov, así como también,

de las dificultades que deben afrontarse a la hora de simular la cinética de plasmas en diferentes sistemas de coordenadas.

Objetivo general

Estudiar, realizar la implementación computacional, y comparar características y resultados de los métodos numéricos existentes, basados en diferencias finitas, volúmenes finitos y semi-Lagrangianos, para la solución del sistema Vlasov-Poisson en geometrías rectangulares y axialmente simétricas.

Objetivos específicos

- Estudiar la teoría cinética de plasmas poniendo especial atención en la función de distribución. Visualizar la evolución de la función de distribución, definida sobre un espacio de fases de seis dimensiones donde la posición y la velocidad son variables independientes.
- Estudiar la formulación de la ecuación de Vlasov no relativista en sus formas ad-
vectiva y conservativa, en coordenadas cartesianas y cilíndricas.
- Revisar la literatura científica sobre electromagnetismo para clasificar los distintos
modelos electromagnéticos que pueden complementar la ecuación de Vlasov.
- Buscar y conocer los métodos numéricos que se usaron y usan actualmente para la
solución de la ecuación de Vlasov. Implementar computacionalmente estos esquemas
basados en diferencias finitas, volúmenes finitos y semi-Lagrangianos.
- Realizar experimentos numéricos clásicos en coordenadas cartesianas para comparar
la precisión y propiedades de conservación de los diferentes esquemas implementa-
dos.
- Estudiar e implementar algunos de los esquemas anteriores en coordenadas cilíndri-
cas orientados para la simulación de problemas axialmente simétricos. Conocer y
afrontar las dificultades adicionales que presenta la solución numérica de la formu-
lación en coordenadas cilíndricas.
- Llevar a cabo simulaciones numéricas para evaluar y comparar los esquemas en
coordenadas cilíndricas. Simular la recolección de corriente y la evolución de la
estructura del plasma en las proximidades de una sonda de Langmuir cilíndrica.
Dicha estructura del plasma está caracterizada por la distribución de electrones e
iones positivos en el espacio físico y de velocidades.

- Extraer conclusiones que permitan caracterizar las fortalezas y debilidades de todos los métodos numéricos estudiados e implementados. Identificar los esquemas que son más aptos para la simulación de los problemas de prueba considerados.
- Analizar las potenciales aplicaciones de los programas desarrollados y de los resultados obtenidos. Algunas de estas aplicaciones podrían ayudar a caracterizar el comportamiento de plasmas en laboratorio y de amarras espaciales electrodinámicas.
- Con la experiencia adquirida, proponer futuras líneas de trabajo para la mejora, extensión y aplicación de los códigos producidos, tanto desde el punto de vista físico, como desde el punto de vista de los métodos numéricos y desarrollos computacionales.

Organización de la tesis

En el Capítulo 2 se presenta una introducción a la física de plasmas y a su modelado matemático. En primer lugar, se hace una reseña sobre los distintos modelos existentes, para luego enfocarse en la descripción de la teoría cinética de plasmas. Además, se introduce el estado del arte de los métodos numéricos para la ecuación de Vlasov, teniendo en cuenta tanto los métodos de partículas como los llamados Eulerianos. Una de las complicaciones más importantes con las que se debe lidiar a la hora de desarrollar herramientas numéricas para la cinética de plasmas no colisionales, es el fenómeno de la filamentación de la función de distribución en el espacio de fases, el cual es presentado brevemente.

El Capítulo 3 se trata sobre la formulación matemática de las ecuaciones de gobierno de la teoría cinética de plasmas. Se introducen conceptos fundamentales como el espacio de fases y la función de distribución, y se derivan las ecuaciones que representan la evolución de dicha función. La ecuación de Vlasov, junto con un modelo electromagnético apropiado, describen la evolución temporal de las funciones de distribución de las partículas que componen un plasma no colisional, y proveen una descripción cinética completa del plasma en los casos donde la dinámica está gobernada por interacciones electromagnéticas de largo alcance. En este capítulo, la ecuación de Vlasov es formulada en su forma advectiva, o de Liouville; y en su forma de ley de conservación, la cual es la base de los métodos de volúmenes finitos. Ambas formulaciones son presentadas respecto del sistema de coordenadas cartesianas clásico, y además, respecto de un sistema de coordenadas cilíndricas. Por otro lado, se expone una compilación exhaustiva de la jerarquía de modelos electromagnéticos existentes que son capaces de complementar a la ecuación de Vlasov.

Los métodos numéricos que se emplearon y emplean para la simulación de la cinética de plasma en coordenadas cartesianas son descriptos en el Capítulo 4. Estos métodos in-

cluyen los basados en diferencias finitas, los semi-Lagrangianos advectivos (o simplemente semi-Lagrangianos), los semi-Lagrangianos conservativos, y los más recientes basados en volúmenes finitos. La única clase de métodos numéricos que ha sido dejada fuera del alcance de este trabajo es la de los basados en elementos finitos y Galerkin discontinuos. Se incluyen aquí esquemas de diferencias finitas de segundo orden, diferentes técnicas de interpolación para los semi-Lagrangianos y reconstrucciones de varios órdenes para los de volúmenes finitos. En este capítulo se introducen, además, los esquemas empleados para la solución de la ecuación de Poisson, la técnica de *splitting* dimensional, y los esquemas de integración temporal explícitos.

En el Capítulo 5 son mostrados los resultados obtenidos en las pruebas numéricas en coordenadas cartesianas. Se lleva a cabo una serie de benchmarks que son utilizados rutinariamente en la evaluación de los esquemas para la solución del sistema Vlasov-Poisson. Se hace una comparación cualitativa y cuantitativa de los resultados obtenidos con los diferentes esquemas, resaltando las virtudes y desventajas de cada uno. En aquellos casos de prueba donde se dispone de soluciones teóricas, la precisión de los esquemas se evalúa contrastando los resultados numéricos con los analíticos. Adicionalmente, se hace una breve comparación de performance entre los distintos códigos.

Los métodos numéricos para Vlasov-Poisson en coordenadas cilíndricas se presentan en el Capítulo 6. En particular, se consideran geometrías axialmente simétricas, lo cual simplifica las ecuaciones de gobierno y su discretización. Aquí se describen esquemas de diferencias finitas de primer y segundo orden, y de volúmenes finitos con distintas reconstrucciones para el cálculo de los flujos. Se han dejado fuera del alcance de este capítulo los métodos semi-Lagrangianos, sin embargo, serán tenidos en cuenta como trabajos futuros.

El Capítulo 7 muestra los resultados de las simulaciones en coordenadas cilíndricas. En primer lugar se prueba la capacidad de los esquemas para preservar en el tiempo una función de distribución en equilibrio termodinámico y uniforme en el espacio. Luego, empleando un esquema de diferencias finitas de primer orden y uno de volúmenes finitos de tercer orden, se simula la recolección de corriente por parte de una sonda de Langmuir cilíndrica. Se analizan y comparan las propiedades del plasma en las inmediaciones de la sonda, destacando las características de cada esquema.

Finalmente, las conclusiones en relación con las metas alcanzadas y los resultados obtenidos son sintetizadas en el Capítulo 8. Las mejoras y extensiones al presente trabajo, que se tendrán en cuenta como líneas futuras de investigación, son introducidas brevemente al final del Capítulo 8.

Capítulo 2

Introducción

2.1. ¿Qué es el Plasma?

Cuando un gas es calentado a temperaturas altas ($\approx 10^4 K$), tales que la energía cinética de las moléculas excede a la energía de ionización, las colisiones separarán algunos electrones de sus órbitas dando lugar a una mezcla de electrones libres, iones y átomos neutros llamada *plasma*. Pese a ser la forma más abundante de materia ordinaria en el universo, el plasma fue descrito por primera vez por el químico Irving Langmuir recién en la década de 1920 (Langmuir, 1928), y es considerado hoy en día como el cuarto estado fundamental de la materia. Otras formas de producir plasma son sometiendo un gas a campos electromagnéticos muy fuertes o impactándolo con un haz de fotones de alta energía.

Con el grado suficiente de ionización, esta sustancia gaseosa se vuelve eléctricamente conductora y responde a las fuerzas electromagnéticas de largo alcance, exhibiendo un comportamiento colectivo que lo caracteriza y lo distingue de los demás fluidos. Adicionalmente, es preciso que la energía cinética media de las partículas cargadas sea mucho mayor que su energía potencial electrostática, ya que es esto lo que lo diferencia de otras formas de materia condensada como los metales.

El plasma puede estar débilmente ionizado o completamente ionizado, donde esto último no significa que el 100 % de los átomos ha perdido electrones sino que la interacción entre partículas está dominada por colisiones de Coulomb. Esto ocurre cuando la frecuencia de colisiones electrón-ión es mucho mayor que la frecuencia de colisiones electrón-neutro, lo cual se puede cumplir con grados de ionización tan bajos como 0,01 %. El grado de ionización estacionario de un plasma resultará del equilibrio entre los procesos de ionización y de recombinación.

Si las densidades de las partículas cargadas positiva y negativamente son iguales, el plasma constituye un medio macroscópicamente neutro y se llama cuasi-neutral, mientras que si hay un exceso de densidad de una de las especies, el plasma es no-neutro. Se

encuentra que la mayoría de los plasmas naturales y los producidos artificialmente tienden a permanecer muy cercanos a la condición de cuasi-neutralidad. Esto se debe a que típicamente un plasma no tiene suficiente energía interna como para volverse no-neutro en distancias mayores a la denominada longitud de Debye. Si se introduce un electrodo polarizado dentro de un plasma, este tenderá a apantallar el campo electrostático del electrodo generando una zona de no-neutralidad llamada *vaina* (o *sheath* en inglés), la cual tiene una extensión del orden de la longitud de Debye.

2.1.1. Parámetros fundamentales

Todo plasma está caracterizado por tres parámetros fundamentales:

- La densidad (n_s) de partículas de cada especie s . Medida en partículas por metro cúbico [m^{-3}].
- La temperatura (T_s) de cada especie. Representa la energía cinética media de las partículas. Medida en Kelvin [K].
- El campo magnético externo (B). Medido en Tesla [T].

A partir de estos tres parámetros principales, se derivan otros parámetros secundarios de gran importancia como:

- La longitud de Debye (λ_{Ds}):

$$\lambda_{Ds} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_s}{n_s q_s^2}}$$

- La frecuencia de plasma (ω_{ps}):

$$\omega_{ps} = \sqrt{\frac{n_s q_s^2}{\epsilon_0 m_s}}$$

- La velocidad térmica (v_{ths}):

$$v_{ths} = \lambda_{Ds} \omega_{ps} = \sqrt{\frac{k_B T_s}{m_s}}$$

- La frecuencia de Ciclotrón (ω_{cs}):

$$\omega_c = \frac{q_s B_{\perp}}{m_s}$$

- El radio de Larmor (r_{gs}):

$$r_g = \frac{m_s v_{\perp}}{|q_s| B}$$

- El parámetro de plasma (N_{Ds}). Se define como la cantidad de partículas contenidas en una esfera de Debye:

$$N_{Ds} = \frac{4}{3}\pi n_s \lambda_{Ds}^3$$

Cuando $N_{De} \gg 1$ se dice que el plasma está débilmente acoplado y los efectos térmicos son mucho mayores que los efectos electrostáticos. Esto es característico de plasmas calientes y poco densos como los plasmas astrofísicos y las descargas eléctricas.

En el caso de los plasmas débilmente ionizados, también son importantes el grado de ionización y la sección media de las partículas neutras.

Un parámetro físico fundamental que determina el comportamiento de un plasma es la relación entre la masa de los iones y electrones (m_i/m_e). Normalmente este valor es grande, lo que causa que la dinámica de los iones y de los electrones sea muy distinta. En muchas situaciones, el comportamiento del plasma está caracterizado por una sola especie mientras que la otra tiene poca influencia.

Se denota como ν_{rs} a la frecuencia de cambio en la cantidad de movimiento de las partículas de la especie r debido a colisiones con las partículas de especie s , y como ν_{Ers} a la frecuencia de cambio en la energía cinética de las partículas de la especie r debido a colisiones con las partículas de especie s . Luego, estas frecuencias se pueden clasificar en tres categorías con órdenes de magnitud diferentes (Bellan, 2006) como se muestra en la tabla siguiente (Cuadro 2.1):

~ 1	$\sim \sqrt{m_e/m_i}$	$\sim m_e/m_i$
ν_{ee}	ν_{ii}	ν_{ie}
ν_{ei}	ν_{Eii}	ν_{Eei}
ν_{Eee}		ν_{Eie}

Cuadro 2.1: Frecuencias de colisión.

Esta disparidad de escalas indica que se debe tener cuidado al definir qué procesos colisionales son relevantes para cada problema.

2.2. Modelado matemático de los plasmas

El modelado matemático del plasma se refiere a escribir y resolver las ecuaciones que describen el estado de un plasma y su evolución. Sin embargo, el modelo que se utiliza no es único, sino que la dinámica de plasmas comprende un abanico de escalas espaciales y temporales tan amplio, que resultan una serie de modelos diferentes, cada uno con sus fortalezas y debilidades. A continuación se mencionan los modelos principales:

2.2.1. El modelo de n cuerpos

Se trata de la descripción más detallada y precisa posible ya que describe al plasma como un conjunto de partículas individuales cargadas eléctricamente que se mueven siguiendo las leyes de la mecánica clásica o relativista, según corresponda. La fuerza actuante sobre cada partícula es la fuerza de Lorentz debida a los campos electromagnéticos aplicados externamente y a los generados por todas las demás partículas. El inconveniente es que cualquier problema de interés consiste de un gran número de partículas (al menos 10^{10}), lo cual lo hace imposible de resolver.

2.2.2. El modelo cinético

La teoría cinética proporciona una de las descripciones teóricas más completas de las que se pueden obtener resultados numéricos. El estado de cada especie es representado por una función escalar de distribución de probabilidad definida en el espacio de fases 6-dimensional. Este espacio de fases contiene a todas las posibles posiciones y velocidades que puede tener una partícula.

La evolución temporal de la función de distribución está dada por la ecuación de Boltzmann, la cual tiene en cuenta los efectos colisionales, o por la ecuación de Vlasov, la cual desprecia completamente la interacción de corto alcance, o por la ecuación de Fokker-Planck, la cual incluye un término de colisiones aproximado. En todos los casos, los campos electromagnéticos auto generados se obtienen resolviendo las ecuaciones de Maxwell u otro modelo simplificado adecuado.

La función de distribución contiene mucha más información que las descripciones fluidas ya que incluye información sobre la distribución de las velocidades de las partículas en cada posición. Por ello, una descripción cinética del plasma es esencial cuando la función de distribución está alejada de una distribución de Maxwell-Boltzmann, la que corresponde a un estado de equilibrio termodinámico.

2.2.3. El modelo giro-cinético

También llamado modelo de centro de guía (o *guiding center*), consiste en promediar las ecuaciones cinéticas sobre el movimiento rápido de ciclotrón, y solamente seguir las trayectorias de los relativamente lentos centros de guía. Tiene la ventaja de capturar la mayoría de los fenómenos cinéticos pero con un costo computacional más bajo, ya que reduce las seis dimensiones del espacio de fases a cinco. Este modelo es aplicable a problemas donde las frecuencias características son mucho menores que la frecuencia de ciclotrón electrónica y ha sido empleado extensamente para la simulación numérica de Tokamaks.

2.2.4. El modelo fluido: MHD

Debido a los efectos colisionales, las partículas se relajan luego de un tiempo hacia una distribución de equilibrio termodinámico. En este estado, se puede describir al plasma a través de cantidades macroscópicas como la densidad, la velocidad media y la energía media. Las ecuaciones para estas cantidades, llamadas ecuaciones fluidas, se derivan a partir de tomar momentos de la ecuación de Boltzmann o la ecuación de Vlasov.

El más usado de estos modelos es la magnetohidrodinámica (MHD), donde el plasma es tratado como un único fluido gobernado por las ecuaciones de Navier-Stokes junto con las ecuaciones de Maxwell. Este modelo es el menos costoso computacionalmente pero tiene la desventaja de no capturar ciertas estructuras e inestabilidades en el plasma.

2.2.5. El modelo de dos fluidos

Provee una descripción más general que la MHD ya que trata a los iones y electrones como dos medios continuos con propiedades macroscópicas distintas que coexisten en el mismo espacio. Tiene la ventaja, respecto del modelo MHD, de que permite estudiar plasmas donde los electrones no están en equilibrio termodinámico con los iones.

2.3. Descripción cinética del plasma

Cuando un plasma presenta desviaciones del equilibrio termodinámico, incluso si éstas son pequeñas o transitorias, su dinámica puede estar gobernada por efectos cinéticos. La teoría cinética representa a cada especie de partículas mediante una función de distribución de probabilidad $f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ en un espacio de fases posición-velocidad (\mathbf{x} - \mathbf{v}) de seis dimensiones, y el estudio de los procesos cinéticos fundamentales en la física de plasmas requiere un cálculo detallado de dichas funciones. El valor de $f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ da una idea de la probabilidad de que una partícula de la especie s se encuentre en la posición \mathbf{x} con una velocidad \mathbf{v} en el instante de tiempo t .

La evolución temporal de la función de distribución de cada especie viene dada por la ecuación de Boltzmann, la cual se reduce a la ecuación de Vlasov en el límite donde los efectos colectivos son dominantes sobre las colisiones binarias entre partículas. Los plasmas astrofísicos y de laboratorio pueden considerarse no colisionales en muchas situaciones en las que la dinámica de las partículas está gobernada por interacciones electromagnéticas de largo alcance (Chen, 2016; Gurnett y Bhattacharjee, 2017; Krall y Trivelpiece, 1973).

Tal enfoque hace posible estudiar los aspectos Hamiltonianos fundamentales que subyacen a la dinámica no lineal de los sistemas de plasma no colisionales, teniendo en cuenta efectos cinéticos como las interacciones onda-partícula. Este modelo también se usa comúnmente para estudiar la propagación de haces de luz y sistemas gravitacionales.

En otras palabras, la ecuación de Vlasov describe la evolución temporal de un sistema de muchas 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. 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.

Matemáticamente, la ecuación de Vlasov es una ecuación en derivadas parciales (PDE) hiperbólica no lineal cuya incógnita, la función de distribución, depende del tiempo, de la posición y de la velocidad. Dado que sólo existen soluciones analíticas para unos pocos casos muy simplificados, los muchos fenómenos de relevancia deben investigarse numéricamente.

2.4. Métodos numéricos para la ecuación de Vlasov

Los códigos para la simulación numérica de plasmas datan desde principios de la década de 1960 (Byers y Killeen, 1970; Grant y Feix, 1967; Hohl y Feix, 1967), donde se usaban diferencias finitas o pocos cientos de macro partículas para estudiar problemas unidimensionales. Desde el principio, se consideraron dos tipos de problemas: la mecánica estadística de un conjunto de partículas cargadas, y el movimiento colectivo del plasma descrito por el sistema Vlasov-Poisson o Vlasov-Maxwell.

Nuestro interés se centra en el segundo tipo de problemas, en el cual las interacciones de Coulomb entre partículas cargadas son reemplazadas por un campo electromagnético medio calculado usando las densidades de carga y de corriente del plasma como fuentes. Esta noción de campo medio dio lugar, primero a los métodos de partículas o *Particle-In-Cell* (PIC), y luego a los métodos que resuelven directamente la ecuación de Vlasov en el espacio de fases.

Actualmente, todos los métodos numéricos empleados para simulación cinética de plasmas caen en alguna de estas dos familias: los métodos de partículas o *Particle-In-Cell* (PIC), y los métodos Eulerianos (también llamados continuos, directos o basados en grillas). No se debe confundir a los métodos de partículas (PIC) con aquellos que resuelven el modelo de n partículas o de n cuerpos (Sección 2.2.1).

2.4.1. Métodos de partículas (PIC)

Históricamente, los métodos PIC han sido los más ampliamente utilizados y los primeros en extenderse a múltiples dimensiones espaciales. Estos aproximan al plasma por un número finito de macro-partículas (o súper-partículas), cada una de las cuales repre-

senta la masa y la carga de muchas partículas del mundo físico. Las trayectorias de estas macro-partículas se calculan siguiendo las curvas características de la ecuación de Vlasov, donde las aceleraciones son las debidas a la fuerza de Lorentz. Por su parte, los campos electromagnéticos auto generados se calculan sobre una malla fija 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. Para más información sobre los métodos de partículas ver (Birdsall y Langdon, 2005; Hockney y Eastwood, 1988; Langdon, 2014; Verboncoeur, 2005).

El principal inconveniente de este enfoque es que el ruido numérico inherente a los métodos PIC 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 (Langdon, 1979; Nevins et al., 2005).

2.4.2. Métodos Eulerianos

Los métodos llamados directos, continuos (*continuum*), basados en grillas (*grid-based*) o Eulerianos, discretizan la función de distribución sobre una malla en el espacio de fases, y avanzan en el tiempo la ecuación de Vlasov directamente. La primera solución de esta clase fue publicada por Knorr en 1963 (Knorr, 1963) usando un método espectral que consistía en una transformada doble de Fourier tanto en x como en v , pero no fue sino hasta 1976 que Cheng y Knorr presentaron el primer código de Vlasov moderno (Cheng y Knorr, 1976), introduciendo dos ideas novedosas: el *splitting* temporal y la reconstrucción de la función de distribución en el espacio de fases.

Durante la década de 1980 los códigos PIC ya eran capaces de realizar simulaciones 2D, lo cual disminuyó el interés de los investigadores en los métodos directos debido a su alto costo computacional. Sin embargo, estos últimos no sufren del ruido estadístico intrínseco a las simulaciones PIC, lo cual hizo que su popularidad aumente junto con la capacidad de las computadoras durante los 90s. Aún actualmente, su aplicación a problemas de cinco o seis dimensiones es poco práctica sino imposible (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.

Dentro de la familia de métodos Eulerianos encontramos una amplia variedad de métodos que incluyen a los espectrales, semi-Lagrangianos (SL), SL conservativos o basados en flujos, diferencias finitas (FD), volúmenes finitos (FV), y elementos finitos (FE).

Los métodos espectrales expresan a la función de distribución como una combinación lineal de funciones de base analíticas en el espacio físico, en el de velocidades, o en ambos.

Luego, utilizan una transformada doble de Fourier para resolver y avanzar la ecuación de Vlasov en el tiempo. Tienen el inconveniente de que, cuando la función de distribución se filamta demasiado en el espacio de fases, se necesitan muchos modos para capturar la solución de manera correcta. Además, para condiciones de borde no periódicas, introducen oscilaciones espurias desde las fronteras (Delzanno, 2015; Klimas y Farrell, 1994; Klimas, 1987).

Métodos de elementos finitos (FEM) y Galerkin discontinuos (DG) también se han propuesto y son muy adecuados para manejar condiciones de contorno complicadas, pero su costo computacional se vuelve demasiado alto en un espacio de fases de más de tres dimensiones (Cheng et al., 2014; Heath et al., 2012; Zaki et al., 1988).

Los métodos directos más ampliamente empleados son los llamados semi-Lagrangianos advectivos (SL), los cuales se valen del hecho de que los valores de la función de distribución se mantienen constantes a lo largo de las curvas características de la ecuación de Vlasov. Consisten en calcular $f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ en cada punto de la grilla siguiendo las curvas características hacia atrás en el tiempo. Para determinar el valor de la función en 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; Gagné y Shoucri, 1977; 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).

Una variación del método semi-Lagrangiano advectivo, es el método de propagación interpolada de gradientes *Cubic Interpolated Propagation* (CIP), que no solo transporta los valores de la función de distribución a lo largo de las características, sino también sus gradientes (Nakamura y Yabe, 1999). Esta variante es más precisa pero mucho más costosa en términos de capacidad de procesamiento y memoria.

Inspirados en los métodos numéricos para la mecánica de fluidos computacional (CFD), 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 de forma natural. Entre estos métodos, encontramos el método de transporte de flujo corregido *Flux-Corrected Transport* (FCT) (Boris y Book, 1973), el método parabólico por segmentos *Piecewise Parabolic Method* (PPM) (Colella y Woodward, 1984; Sircombe y Arber, 2009), el método de balance de flujos *Flux Balance Method* (FBM) (Fijalkow, 1999a), el método de conservación de flujos y positividad *Positive and Flux Conservative* (PFC) (Filbet et al., 2001), el método esencialmente no oscilatorio *Essen-*

tially Non-Oscillatory (ENO o WENO) (Qiu y Christlieb, 2010; Qiu y Shu, 2011) y el método de splines parabólicos *Parabolic Spline Method* (PSM) (Crouseilles et al., 2010; Umeda et al., 2012). Las principales diferencias entre ellos son, el tipo de reconstrucción utilizada para aproximar la función de distribución dentro de cada celda, y los limitadores de flujo aplicados, si los hay.

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 predictor-correctores, métodos de tipo Runge-Kutta implícitos y explícitos, y los de múltiples etapas (*Linear Multistep Methods*). El empleo de discretizaciones de alto orden mejora la precisión espacial y temporal de la solución.

Como toda PDE hiperbólica de primer orden en la forma de ley de conservación, la ecuación de Vlasov se puede resolver utilizando esquemas basados en diferencias finitas totalmente discretos, como los esquemas Lax-Wendroff (LW) o MacCormack (MC) (Horne y Freeman, 2001). Métodos semi discretos de este tipo, también llamados métodos de líneas (MOL), se han implementado utilizando fórmulas de diferencias finitas compactas (Lele, 1992) de alto orden para la discretización del espacio de fases (Arber y Vann, 2002), aunque también se han propuesto esquemas de bajo orden (Valentini et al., 2005).

2.4.3. PIC vs Eulerianos

A la hora de resolver un problema particular, es usual que surja la pregunta sobre si es conveniente emplear un método de partículas o uno continuo. Sea $N_{Eulerian}$ el número total de nodos o celdas que discretizan el espacio de fases en un código continuo, y N_{PIC} el número total de macro partículas correspondiente a un código PIC. Suponiendo que el esquema usado para calcular los campos electromagnéticos resolviendo las ecuaciones de Maxwell, o Poisson en el caso electrostático, es el mismo, entonces el costo computacional de un código Euleriano, en relación con un código PIC, será proporcional a $N_{Eulerian}/N_{PIC}$. La siguiente tabla (Cuadro 2.2) da una idea aproximada de la dependencia que tiene esta relación de la cantidad de dimensiones del espacio de velocidades d_v del problema que se desea resolver (Feix y Bertrand, 2005):

	$d_v = 1$	$d_v = 2$	$d_v = 3$
$g_{PIC} = 10^{-2}$	10^0	10^2	10^4
$g_{PIC} = 10^{-4}$	10^{-2}	10^0	10^4
$g_{PIC} = 10^{-6}$	10^{-4}	10^{-2}	10^0

Cuadro 2.2: Relación $N_{Eulerian}/N_{PIC}$.

Donde g_{PIC} es una medida de la resolución de la grilla necesaria:

$$g_{PIC} = \frac{1}{n_0 \lambda_{De}^{d_x}}$$

Se deduce que para espacios de velocidades 1D, los códigos Eulerianos son la opción de preferencia mientras que para espacios de velocidad tridimensionales, los códigos de partículas siguen siendo la única opción. Si el espacio de velocidades es 2D, entonces la elección dependerá de la precisión requerida y del nivel de ruido aceptable.

2.4.4. Splitting dimensional

Los códigos semi-Lagrangianos, tanto advectivos como conservativos, 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 para cada variable espacial 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 de advección constante. Este principio se usa ampliamente en la dinámica de fluidos computacional y se aplicó por primera vez a la solución de la ecuación de Vlasov por (Cheng y Knorr, 1976) en el límite electrostático.

En los casos en que la velocidad de advección no es constante sino que depende de la variable siendo convectada, como en el régimen electromagnético completo o en el modelo del centro de guía (*guiding center model*), o incluso en la aproximación electrostática con las ecuaciones escritas en coordenadas cilíndricas, la separación dimensional puede generar malas propiedades de conservación, especialmente para tiempos de simulación largos (Huot et al., 2003).

Para enfrentar este problema, pueden hacerse advecciones bi o tridimensionales, lo cual implica realizar interpolaciones multi dimensionales (Sonnendrücker et al., 1999), o se puede tratar la ecuación de Vlasov en forma conservativa, lo que permite reducir el problema a avanzar leyes de conservación unidimensionales (Elkina y Büchner, 2006; Fijalkow, 1999b; Filbet et al., 2001; Umeda, 2008). Otra opción es implementar algoritmos de separación de alto orden como los detallados por Yoshida (Yoshida, 1990).

La extensión de la técnica de separación a espacios físicos y de velocidades multi dimensionales fue llevada a cabo por (Mangeney et al., 2002) usando sub-separaciones. Esto permite reducir un paso de advección multi dimensional a una secuencia de muchas advecciones unidimensionales.

2.4.5. Filamentación

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 $f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ que inicialmente estaban muy alejadas en el espacio de fases, se acerquen y mezclen produciendo gradientes pronunciados. Esto es lo que se conoce como el problema de la filamentación.

Otra forma de ver la raíz de dicho problema es analizar el término convectivo libre de la ecuación de Vlasov unidimensional:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

La cual tiene una solución general en el espacio de Fourier de la forma:

$$f(t, k, v) = f(0, k, v) e^{ikvt}$$

Claramente $f(t, k, v)$ oscilará con respecto a v con una frecuencia kt . Después de algún tiempo en la simulación, la malla numérica será demasiado gruesa como para capturar correctamente estas oscilaciones o filamentos y, en algunos casos, la formación de escalas cada vez más pequeñas en el espacio de velocidades puede resultar en un comportamiento numéricamente inestable.

La mayoría de los *solvers* de Vlasov suavizan, de alguna manera, estas pequeñas estructuras causando un aumento no físico de la entropía. Sin embargo, esta característica es un mal necesario para la estabilidad del esquema. El problema del tratamiento numérico de la filamentación es similar al encontrado en el estudio de ondas de choque en CFD.

Capítulo 3

Ecuaciones de gobierno de la cinética de plasmas

La teoría cinética de plasmas proviene de la mecánica estadística, en donde un sistema de partículas, que puede no estar en equilibrio termodinámico, es representado por una función escalar de densidad de probabilidad en el espacio de fases. Su principal diferencia con la teoría cinética de gases, es que la interacción entre las partículas no está gobernada solamente por colisiones binarias, sino también por fuerzas electromagnéticas de largo alcance.

3.1. Espacio de fases y función de distribución

Imagine una partícula puntual que se mueve en un espacio unidimensional con su posición dada como $x = x(t)$ y su velocidad como $v = v(t)$. Una forma conveniente de visualizar simultáneamente tanto su trayectoria en x como en v , es representar ambas mediante una curva bidimensional sobre un plano donde la coordenada horizontal está dada por $x(t)$ y la vertical por $v(t)$. Este plano x - v es el llamado *espacio de fases* correspondiente a este sistema.

En general, el espacio de fases asociado con un sistema dinámico, es un espacio vectorial en el cual están representados todos los posibles estados que puede tener el sistema, donde cada estado está normalmente conformado por las componentes de posición y velocidad, o de posición y cantidad de movimiento. En este sentido, cualquier estado posible del sistema se corresponde con un único punto en el espacio de fases. Un inconveniente de esta representación es que resulta imposible dibujar (e incluso imaginar) espacios de fases de dimensión mayor que 3, siendo que en cinética de plasmas es común trabajar con espacios de 4, 5 o 6 dimensiones.

En un momento dado, cada partícula dentro de un plasma tiene una posición y una velocidad específicas. Por lo tanto, si el número de partículas es lo suficientemente grande,

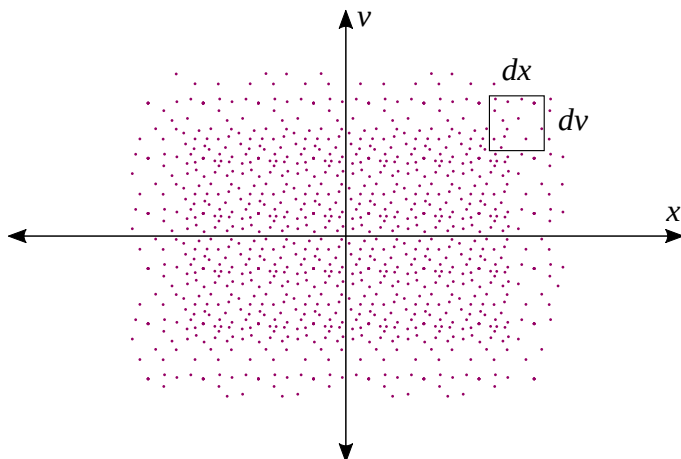


Figura 3.1: Espacio de fases.

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} (ver Fig. 3.1). Notar que es necesaria una función de distribución diferente por cada especie de partículas que componga el plasma.

Claramente, si se integra la función de distribución sobre todo el espacio de fases, dará como resultado el número total de partículas de esa especie que componen el sistema. Si $f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ se normaliza a 1, ésta indica la probabilidad, por unidad de volumen del espacio de fases, de encontrar una partícula de la especie s , en la posición \mathbf{x} , y con una velocidad \mathbf{v} . Dada dicha normalización, $f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ es efectivamente una función de distribución de probabilidad en lugar de una función de distribución de densidad.

Usar la evolución de f para caracterizar el sistema de partículas no registra información sobre las trayectorias de las partículas individuales sino que caracteriza categorías de partículas con similar posición y velocidad. Esta aproximación es, no obstante, más detallada que una descripción fluida, la cual no incluye ninguna información sobre la distribución de velocidades de las partículas.

3.2. Evolución de la función de distribución

La evolución temporal de la función de distribución está dada por la ecuación de Boltzmann, la cual tiene en cuenta tanto la continuidad de $f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ en el espacio de fases como los efectos colisionales. Si se desprecian las colisiones entre partículas, entonces la ecuación de Boltzmann se reduce a la ecuación de Vlasov. En todos los casos, la aceleración de las partículas es debida a los campos electromagnéticos externos y auto generados, donde estos últimos se obtienen resolviendo las ecuaciones de Maxwell, o la ecuación de

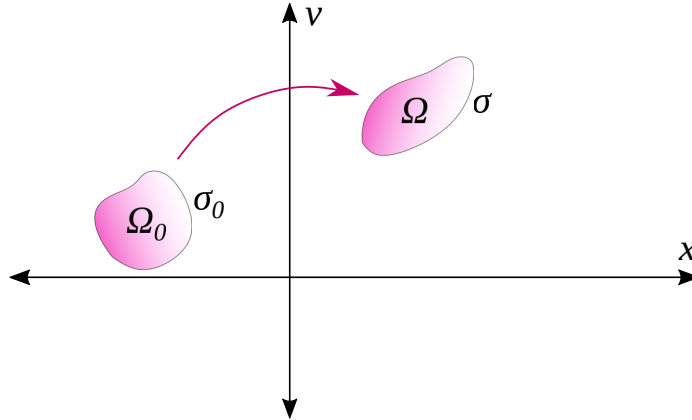


Figura 3.2: Conservación de f en el espacio de fases.

Poisson en el caso electrostático.

3.2.1. Teorema de Liouville y ecuación de Boltzmann

El teorema de Liouville es un teorema fundamental de la mecánica Hamiltoniana y estadística. Establece que la función de distribución es constante a lo largo de cualquier trayectoria del sistema en el espacio de fases (Bradt, 2008; Pathria y Beale, 2011; Sone, 2002).

Considere el sistema dinámico Hamiltoniano conformado por un conjunto de partículas que se mueven en el espacio de fases $(\mathbf{x}-\mathbf{v})$ interactuando bajo los efectos de las fuerzas de Coulomb mutuas y de campos electromagnéticos externos. En un tiempo cualquiera t_0 , supongamos que existe un pequeño volumen $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^6$ en el espacio de fases delimitado por la superficie $\sigma_0 \subset \mathbb{R}^5$. Un tiempo después, las partículas que en t_0 estaban sobre la superficie σ_0 , se habrán desplazado delimitando una nueva superficie σ como se muestra en la Fig. 3.2. El volumen encerrado por esta nueva superficie se mantendrá constante, dado que los sistemas Hamiltonianos tienen la propiedad de preservar volúmenes en el espacio de fases.

Una segunda propiedad fundamental proviene de la suposición de que el plasma es no colisional. Al despreciar las colisiones binarias entre partículas, entonces no puede haber variaciones discontinuas de sus velocidades, lo cual implica que las partículas no se crean ni se destruyen en el espacio de fases. Como consecuencia, las partículas que estaban contenidas dentro de σ_0 en t_0 , serán las mismas que están contenidas en σ un tiempo después, esto es:

$$\int_{\Omega_0} f(t_0, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x}d\mathbf{v} = \int_{\Omega} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{x}d\mathbf{v} \quad (3.1)$$

Si hacemos tender σ a un punto (y consecuentemente hacemos $\Omega \rightarrow 0$), entonces la Ec. 3.1 implica que la densidad local de partículas $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ será constante a lo largo de

las trayectorias del sistema en el espacio de fases, es decir:

$$f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = f(t_0, \mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0) \quad (3.2)$$

O, dicho de otro modo, que la derivada material, convectiva o total de f es nula:

$$\frac{D}{Dt} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = 0 \quad (3.3)$$

Sin embargo, las colisiones sí ocurren, y son capaces de dispersar bruscamente las partículas haciendo que f varíe a lo largo de las trayectorias. Para tener en cuenta la variación de f por efecto de las colisiones binarias, puede agregarse un término fuente en el lado derecho de la ecuación anterior, llamado término de colisiones. Luego, la Ec. 3.3 se reescribe como:

$$\frac{D}{Dt} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.4)$$

El significado de la expresión anterior se vuelve más claro si se recuerda que f depende, en general, de 7 variables independientes: tres coordenadas espaciales, tres de velocidad (o de cantidad de movimiento) y el tiempo. Luego, el diferencial total de f se escribe:

$$\begin{aligned} Df &= \frac{\partial f}{\partial t} dt + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \cdot d\mathbf{x} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \cdot d\mathbf{v} \\ &= \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{a} \right) dt \end{aligned} \quad (3.5)$$

Dividiendo el diferencial total de f por dt y sustituyendo en la Ec. 3.4, se obtiene la ecuación de Boltzmann no relativista:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (3.6)$$

En este contexto, \mathbf{a} es la aceleración de las partículas debida solamente a la fuerza de Lorentz y no a las fuerzas actuantes en las colisiones, las cuales se contemplan por medio del término colisional:

$$\mathbf{a}_s = \frac{q_s}{m_s} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (3.7)$$

donde q_s y m_s son la carga eléctrica y la masa de las partículas de la especie s , respectivamente. Los campos eléctrico $\mathbf{E}(t, \mathbf{x})$ y magnético $\mathbf{B}(t, \mathbf{x})$ representan a los campos totales, es decir, a la suma de los campos auto generados más los aplicados externamente. Notar que \mathbf{a} depende implícitamente de la posición a través de los campos, y explícitamente de la velocidad, siempre que \mathbf{B} no sea despreciable.

La forma específica del término en el lado derecho de la Ec. 3.6 (término de colisiones) depende de las características del problema a resolver. Un operador de colisiones amplia-

mente usado es el operador de Fokker-Planck, en cuyo caso, la ecuación de Boltzmann suele llamarse ecuación de Fokker-Planck.

3.2.2. La ecuación de Vlasov

En el límite donde las frecuencias de colisión, sintetizadas en el Cuadro 2.1 (ver Capítulo 2), son grandes en relación con las frecuencias características del problema, los caminos libres medios de las partículas serán relativamente pequeños y éstas intercambiarán rápidamente energía y cantidad de movimiento entre sí. En esta situación, la distribución de velocidades tiende hacia una distribución de Maxwell-Boltzmann y el sistema tiende hacia el equilibrio termodinámico. Si se asume una distribución Maxwelliana, la descripción cinética puede reducirse a la descripción fluida (o de dos fluidos), donde las variables macroscópicas de interés son la densidad, la cantidad de movimiento y la energía, las cuales se obtienen tomando momentos de velocidad de la ecuación de Boltzmann. De esta manera, el sistema pasa de estar definido en un espacio de fases de 6 dimensiones a un espacio físico de 3 dimensiones.

En el límite opuesto, cuando las colisiones binarias son poco frecuentes, como ocurre en el caso de plasmas calientes y/o poco densos, la dinámica está gobernada por las interacciones electromagnéticas de largo alcance y el término del lado derecho de la Ec. 3.6 puede despreciarse. La ecuación resultante se conoce como *ecuación de Vlasov*, ecuación de Boltzmann no colisional o ecuación de Liouville para una partícula:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0 \quad (3.8)$$

En particular, la expresión anterior (Ec. 3.8) es llamada la forma advectiva o forma de Liouville de la ecuación de Vlasov no relativista. Es común escribir la fuerza de Lorentz explícitamente en la ecuación de Vlasov, reemplazando la aceleración \mathbf{a} según la Ec. 3.7:

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_s}{m_s} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{v}} = 0 \quad (3.9)$$

El subíndice s denota que se trata de la ecuación de Vlasov correspondiente a la función de distribución de la especie s . Por comodidad, este subíndice será siempre omitido a menos que sea necesario.

3.2.3. Forma conservativa de la ecuación de Vlasov

Hemos visto que, en el límite no colisional, la función de distribución obedece una ecuación de continuidad en el espacio de fases llamada ecuación de Vlasov. Matemáticamente, se trata de una ecuación en derivadas parciales no lineal de la clase hiperbólica

y es posible expresarla en la forma de una ley de conservación o forma conservativa. La formulación conservativa se deriva de manera análoga a como se hace en la mecánica de los fluidos para obtener la ecuación de continuidad.

Imaginemos un volumen de control finito $\Omega \subset \mathbb{R}^6$ en el espacio de fases delimitado por una superficie cerrada $\sigma \subset \mathbb{R}^5$, como se ilustra en la Fig. 3.3. La variación en el tiempo de la cantidad de partículas dentro de Ω será:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\Omega \quad (3.10)$$

Asimismo, el flujo neto de partículas a través de la superficie σ será:

$$\oint_{\sigma} \mathbf{F}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, f) \cdot \hat{\mathbf{n}} d\sigma = \oint_{\sigma} \mathbf{F}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, f) \cdot d\boldsymbol{\sigma} \quad (3.11)$$

donde \mathbf{F} es el vector flujo de f y $\hat{\mathbf{n}}$ es un vector unitario normal a σ con dirección hacia afuera. Por conservación de las partículas, la suma de la variación interna de la cantidad de partículas dentro del volumen de control más el flujo a través de su frontera debe ser nula, esto es:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\Omega + \oint_{\sigma} \mathbf{F}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, f) \cdot d\boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (3.12)$$

La expresión anterior se denomina forma débil de la ley de conservación de f . Usando el teorema de la divergencia, la integral de superficie en el segundo término de la Ec. 3.12 puede transformarse en una integral de volumen sobre Ω . Luego, como la igualdad debe cumplirse cualquiera sea el dominio de integración, las integrales pueden omitirse resultando la formulación diferencial o fuerte de la ley de conservación:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{F} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \cdot \mathbf{F} \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde el subíndice $\mathbf{u} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ nos recuerda que la divergencia del vector flujo está definida, en general, en un espacio de 6 dimensiones. La formulación conservativa, dada por las ecuaciones 3.12 y 3.13, es muy útil ya que permite resolver numéricamente la ecuación de Vlasov de manera tal que se satisfaga el teorema de la divergencia a nivel discreto, asegurando la conservación local y global de la cantidad de partículas cometiendo solamente el error de truncamiento de la computadora. La forma débil (Ec. 3.12), además, admite soluciones discontinuas lo que significa una ventaja frente a la forma fuerte (Ec. 3.13).

Matemáticamente, la forma de Liouville y la forma conservativa de la ecuación de Vlasov son equivalentes, pero numéricamente, la segunda tiene ciertas propiedades que la hacen conveniente.

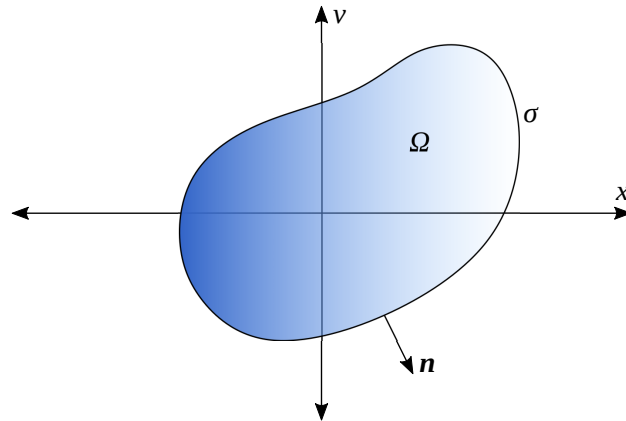


Figura 3.3: Volumen de control en el espacio de fases.

3.2.4. Formulación en coordenadas cartesianas

Hasta ahora no se ha dicho nada en relación con el sistema de coordenadas respecto del cual se miden las componentes de posición y de velocidad en el espacio de fases, no obstante, las expresiones dadas para la ecuación de Boltzmann (Ec. 3.6) y para la ecuación de Vlasov (Ec. 3.8), asumen que:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} \quad y \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{a} \quad (3.14)$$

Esto se cumple si las componentes de \mathbf{x} y \mathbf{v} se miden respecto de un sistema cartesiano, pero no es cierto en otros sistemas de coordenadas ortogonales como, por ejemplo, en coordenadas cilíndricas. Pese a esta falta de generalidad, las ecuaciones de gobierno fueron introducidas de esa forma por ser la que se encuentra más comúnmente en los libros y textos científicos (Feix y Bertrand, 2005; Vedenyapin et al., 2011).

En un sistema de coordenadas cartesianas, las componentes del vector posición $\mathbf{u} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})$ de un punto del espacio de fases están dadas por:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

Mientras que las componentes de la derivada temporal del vector de posición son:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \begin{bmatrix} \dot{v}_x \\ \dot{v}_y \\ \dot{v}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

Usando estas definiciones, la forma de Liouville de la ecuación de Vlasov (Ec. 3.8) puede expandirse como sigue:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} + a_x \frac{\partial f}{\partial v_x} + a_y \frac{\partial f}{\partial v_y} + a_z \frac{\partial f}{\partial v_z} = 0 \quad (3.18)$$

donde las componentes de la aceleración, debidas a la fuerza de Lorentz, son:

$$\begin{bmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} = \frac{q}{m} \begin{bmatrix} E_x + v_y B_z - v_z B_y \\ E_y + v_z B_x - v_x B_z \\ E_z + v_x B_y - v_y B_x \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

Por otro lado, resulta inmediato expresar la ecuación de Vlasov en la forma conservativa (Ec. 3.13) escribiendo la divergencia en términos de las coordenadas cartesianas de \mathbf{u} , y el vector flujo \mathbf{F} , definidos como:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \dot{x}f \\ \dot{y}f \\ \dot{z}f \\ \dot{v}_x f \\ \dot{v}_y f \\ \dot{v}_z f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_x f \\ v_y f \\ v_z f \\ a_x f \\ a_y f \\ a_z f \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

Con lo cual, la forma conservativa fuerte puede expandirse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (v_x f) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y f) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z f) + \frac{\partial}{\partial v_x} (a_x f) + \frac{\partial}{\partial v_y} (a_y f) + \frac{\partial}{\partial v_z} (a_z f) = 0 \quad (3.21)$$

o en forma vectorial:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot (\mathbf{v}f) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{a}f) = 0 \quad (3.22)$$

La equivalencia matemática entre la forma advectiva o de Liouville (Ec. 3.8), y la forma conservativa fuerte (Ec. 3.22) es evidente ya que \mathbf{v} no depende de \mathbf{x} , por ser coordenadas independientes, y que:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{a} = \frac{q}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) = \frac{q}{m} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial v_x} (v_y B_z - v_z B_y) \\ \frac{\partial}{\partial v_y} (v_z B_x - v_x B_z) \\ \frac{\partial}{\partial v_z} (v_x B_y - v_y B_x) \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (3.23)$$

Integrar la forma fuerte de la ecuación de Vlasov (Ec. 3.21) sobre un diferencial de volumen en el espacio de fases $d\Omega = dx dy dz dv_x dv_y dv_z$, da como resultado la forma débil de la ley de conservación (Ec. 3.12), con los diferenciales de superficie en cada dirección dados por:

$$d\sigma = \begin{bmatrix} dy dz dv_x dv_y dv_z \\ dx dz dv_x dv_y dv_z \\ dx dy dv_x dv_y dv_z \\ dx dy dz dv_y dv_z \\ dx dy dz dv_x dv_z \\ dx dy dz dv_x dv_y \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

Puede apreciarse que, en general, la variación de la cantidad de partículas dentro de un pequeño volumen del espacio de fases estará determinada por el flujo de f a través de 6 superficies 5-*dimensionales* ortogonales entre sí.

3.2.5. Formulación en coordenadas cilíndricas

El empleo de un sistema de coordenadas cartesianas para determinar las posiciones, y cualquier otro elemento geométrico en el espacio de fases, simplifica enormemente la derivación de las ecuaciones de evolución de la función de distribución y el tratamiento numérico de las mismas. Esta es una de las razones por las cuales se encuentran relativamente escasos trabajos usando sistemas diferentes.

En esta sección, vamos a derivar la ecuación de Vlasov en sus formas advectiva y conservativa en coordenadas cilíndricas, lo cual no es tan directo como consecuencia de que la base del espacio vectorial es ahora no ortogonal y local (no global). Esto último, significa que los vectores de base en cada punto del espacio de fases dependen de las coordenadas de dicho punto. Adicionalmente, los elementos de superficie y de volumen del espacio de fases dependen de la coordenada radial. Esto se verá reflejado en el determinante de la matriz Jacobiana de la transformación entre coordenadas cartesianas y cilíndricas, el que será distinto de 1.

Para evitar confusiones, se denota como \mathbf{u}_x al vector de posición de un punto del espacio de fases con sus componentes expresadas en un sistema de coordenadas cartesianas, y como \mathbf{u}_r al mismo vector pero escrito en coordenadas cilíndricas:

$$\mathbf{u}_x = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_r = \begin{bmatrix} r \\ \theta \\ z \\ v_r \\ v_\theta \\ v_z \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

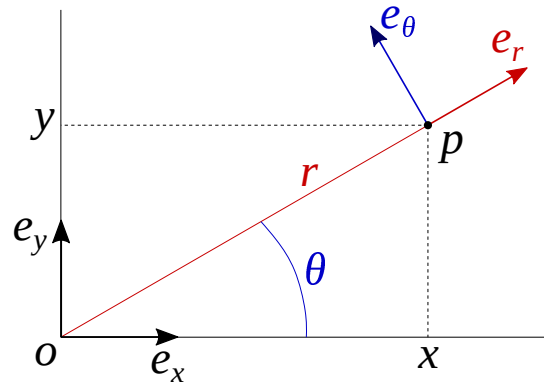


Figura 3.4: Coordenadas cilíndricas de un punto p en un sub-espacio físico 2D del espacio de fases.

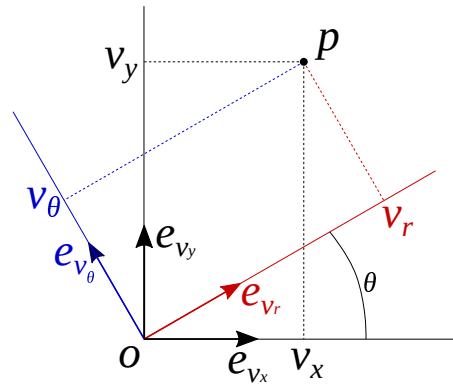


Figura 3.5: Coordenadas cilíndricas de un punto p en un sub-espacio de velocidades 2D del espacio de fases.

Tener presente que el vector de posición de un punto es un único vector, lo que cambia es la forma de escribirlo respecto de una base u otra. Ocasionalmente, usaremos estos mismos símbolos, \mathbf{u}_x y \mathbf{u}_r , para referirnos a los conjuntos de las coordenadas cartesianas y cilíndricas, respectivamente.

Es importante remarcar que el sistema de coordenadas cilíndricas usado aquí no es el clásico sistema tridimensional (r, θ, z) encontrado habitualmente en los libros de texto. De hecho, los vectores de base en las direcciones (r, θ, z) definen un sub-espacio de dimensión 3 del espacio de fases para cada punto (v_r, v_θ, v_z) del espacio de velocidades (ver Fig. 3.4). Similarmente, en cada punto (r, θ, z) del espacio físico, los vectores de base en las direcciones (v_r, v_θ, v_z) definen otro sub-espacio de dimensión 3 del espacio de fases (ver Fig. 3.5).

Para derivar la forma advectiva de la ecuación de Vlasov cilíndrica, se recuerda el teorema de Liouville, el cual enuncia que la función de distribución es constante a lo largo de cualquier trayectoria en el espacio de fases, independientemente del sistema de

coordenadas que se use para especificar esa trayectoria. Luego, la Ec. 3.3 se puede escribir:

$$\frac{D}{Dt}f(t, \mathbf{u}_r) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial r}\dot{r} + \frac{\partial f}{\partial \theta}\dot{\theta} + \frac{\partial f}{\partial z}\dot{z} + \frac{\partial f}{\partial v_r}\dot{v}_r + \frac{\partial f}{\partial v_\theta}\dot{v}_\theta + \frac{\partial f}{\partial v_z}\dot{v}_z = 0 \quad (3.26)$$

Es necesario ahora, expresar las derivadas temporales de las coordenadas, denotadas con el punto, en función de las variables que conocemos. Para ello, se escribe el vector posición \mathbf{r} de un punto del espacio en coordenadas cilíndricas, así como también sus derivadas temporales primera y segunda:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= r\hat{\mathbf{e}}_r + z\hat{\mathbf{e}}_z \\ \dot{\mathbf{r}} &= \dot{r}\hat{\mathbf{e}}_r + r\dot{\theta}\hat{\mathbf{e}}_\theta + \dot{z}\hat{\mathbf{e}}_z \\ \ddot{\mathbf{r}} &= \left(\ddot{r} - r\dot{\theta}^2\right)\hat{\mathbf{e}}_r + \left(r\ddot{\theta} + 2\dot{r}\dot{\theta}\right)\hat{\mathbf{e}}_\theta + \ddot{z}\hat{\mathbf{e}}_z \end{aligned} \quad (3.27)$$

De donde se desprenden las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} \dot{r} &= v_r & \dot{v}_r &= a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \\ \dot{\theta} &= \frac{v_\theta}{r}, & \dot{v}_\theta &= a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \\ \dot{z} &= v_z & \dot{v}_z &= a_z \end{aligned} \quad (3.28)$$

Introduciendo las relaciones 3.28 en la Ec. 3.26, resulta la forma de Liouville de la ecuación de Vlasov en coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} + \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r}\right) \frac{\partial f}{\partial v_r} + \left(a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r}\right) \frac{\partial f}{\partial v_\theta} + a_z \frac{\partial f}{\partial v_z} = 0 \quad (3.29)$$

Si se compara esta expresión con la obtenida en coordenadas cartesianas, puede apreciarse que han aparecido dos términos adicionales en las aceleraciones. El término v_θ^2/r está asociado con la aceleración centrípeta, mientras que $-v_r v_\theta/r$ está asociado con la aceleración de Coriolis. Las demás aceleraciones son las debidas a la fuerza de Lorentz:

$$\begin{bmatrix} a_r \\ a_\theta \\ a_z \end{bmatrix} = \frac{q}{m} \begin{bmatrix} E_r + v_\theta B_z - v_z B_\theta \\ E_\theta + v_z B_r - v_r B_z \\ E_z + v_r B_\theta - v_\theta B_r \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

Se puede arribar al mismo resultado mediante el uso de los coeficientes de Lamé o de los símbolos de Christoffel (Diaz, 1981; Kogan, 1969; Shakhov, 1971; Vinokur, 1974). Otra forma, que se considera particularmente rica desde el punto de vista matemático y geométrico, es realizando una transformación de coordenadas desde el sistema cartesiano al cilíndrico.

Las ecuaciones de transformación directas desde el sistema definido por \mathbf{u}_x al sistema

definido por \mathbf{u}_r , son:

$$\mathbf{u}_r = \begin{bmatrix} r \\ \theta \\ z \\ v_r \\ v_\theta \\ v_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x^2 + y^2)^{1/2} \\ 2 \arctan \left(\frac{y}{r+x} \right) \\ z \\ \frac{xv_x + yv_y}{(x^2 + y^2)^{1/2}} \\ \frac{xv_y - yv_x}{(x^2 + y^2)^{1/2}} \\ v_z \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

y las ecuaciones de transformación inversas son:

$$\mathbf{u}_x = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \cos \theta \\ r \sin \theta \\ z \\ v_r \cos \theta - v_\theta \sin \theta \\ v_r \sin \theta + v_\theta \cos \theta \\ v_z \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

Se ve fácilmente que las ecuaciones 3.31 y 3.32 son diferenciables y, por lo tanto, es posible representar la transformación mediante la matriz Jacobiana \mathbf{J} definida como:

$$\mathbf{J} = \left[\frac{\partial \mathbf{u}_x}{\partial \mathbf{u}_r} \right] \quad (3.33)$$

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -r \sin \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sin \theta & r \cos \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -v_r \sin \theta - v_\theta \cos \theta & 0 & \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ 0 & v_r \cos \theta - v_\theta \sin \theta & 0 & \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

Donde la columna j -ésima de la matriz \mathbf{J} está compuesta por el conjunto de las coordenadas \mathbf{u}_x derivado respecto de la coordenada j -ésima de \mathbf{u}_r . El determinante de la matriz Jacobiana, o simplemente, el Jacobiano J es:

$$J = \det \mathbf{J} = r \quad (3.35)$$

La matriz Jacobiana de la transformación inversa es, a su vez, la inversa de \mathbf{J} y se calcula empleando las ecuaciones 3.31, obteniéndose:

$$\mathbf{J}^{-1} = \left[\frac{\partial \mathbf{u}_r}{\partial \mathbf{u}_x} \right] \quad (3.36)$$

$$\mathbf{J}^{-1} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\sin \theta}{r} & \frac{\cos \theta}{r} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v_\theta \frac{\sin \theta}{r} & v_\theta \frac{\cos \theta}{r} & 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ v_r \frac{\sin \theta}{r} & -v_r \frac{\cos \theta}{r} & 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

$$J^{-1} = \det [\mathbf{J}^{-1}] = \frac{1}{r} \quad (3.38)$$

Una vez determinada la matriz de transformación \mathbf{J}^{-1} , la ecuación de Vlasov en coordenadas cartesianas (Ec. 3.8) puede transformarse a coordenadas cilíndricas de la manera siguiente:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}_x \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}_x} \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}_x \cdot \left(\left[\frac{\partial \mathbf{u}_r}{\partial \mathbf{u}_x} \right]^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}_r} \right) \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u}_x \cdot \left([\mathbf{J}^{-1}]^T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}_r} \right) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Lo cual se puede poner más explícitamente sustituyendo las expresiones para el vector \mathbf{u}_x y para la matriz $[\mathbf{J}^{-1}]$ según las Ecs. 3.16-3.17 y 3.37, respectivamente, esto es:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \\ a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} \cdot \left(\begin{bmatrix} \cos \theta & -\frac{\sin \theta}{r} & 0 & -v_\theta \frac{\sin \theta}{r} & v_r \frac{\sin \theta}{r} & 0 \\ \sin \theta & \frac{\cos \theta}{r} & 0 & v_\theta \frac{\cos \theta}{r} & -v_r \frac{\cos \theta}{r} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial r} \\ \frac{\partial f}{\partial \theta} \\ \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial f}{\partial v_r} \\ \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \\ \frac{\partial f}{\partial v_z} \end{bmatrix} \right) = 0 \quad (3.40)$$

Efectuando los productos, y usando las relaciones geométricas:

$$\begin{aligned} v_r &= v_x \cos \theta + v_y \sin \theta \\ v_\theta &= v_y \cos \theta - v_x \sin \theta \\ a_r &= a_x \cos \theta + a_y \sin \theta \\ a_\theta &= a_y \cos \theta - a_x \sin \theta \end{aligned} \quad (3.41)$$

se obtiene la expresión para la forma de Liouville de la ecuación de Vlasov en coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} + \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_r} + \left(a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_\theta} + a_z \frac{\partial f}{\partial v_z} = 0 \quad (3.42)$$

Notar que se trata de la misma expresión conseguida anteriormente (Ec. 3.29).

A fin de determinar la formulación conservativa, será necesario emplear una definición generalizada de la divergencia de un campo vectorial y escribir el vector flujo respecto del sistema de coordenadas cilíndricas. Sean (u_1, \dots, u_n) un conjunto de coordenadas curvilíneas generalizadas y \mathbf{F} un campo vectorial en \mathbb{R}^n , entonces la divergencia de \mathbf{F} se puede escribir usando la notación de Einstein como (Spiegel, 2002):

$$\nabla_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{F} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\sqrt{g} \frac{F_i}{h_i} \right) \quad (3.43)$$

donde g es el determinante del tensor métrico, $h_i = \sqrt{g_{ii}}$ son los factores de escala asociados con cada coordenada, y F_i son las componentes de \mathbf{F} medidas respecto de la base normalizada. En el caso de nuestro sistema cilíndrico no ortogonal dado por \mathbf{u}_r , el determinante \sqrt{g} es igual al de la matriz Jacobiana 3.34, es decir:

$$\sqrt{g} = J = r \quad (3.44)$$

Para escribir las componentes F_{r_i} del vector flujo, respecto del sistema cilíndrico, se aplican las ecuaciones de transformación de base a partir de las componentes cartesianas F_{x_j} :

$$\frac{F_{r_i}}{h_i} = \frac{\partial u_{r_i}}{\partial u_{x_j}} F_{x_j} = \frac{\partial u_{r_i}}{\partial \mathbf{u}_x} \cdot \mathbf{F}_x \quad (3.45)$$

Donde se ha introducido la notación \mathbf{F}_x para referir al conjunto de las componentes F_{x_j} , de la misma forma que \mathbf{F}_r simboliza el conjunto de las F_{r_i} . Luego, introduciendo la transformación de coordenadas 3.45 en la expresión general para la divergencia, resulta:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{F} &= \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial u_{r_i}} \left(J \frac{\partial u_{r_i}}{\partial u_{x_j}} F_{x_j} \right) \\ &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_r} \cdot (r [\mathbf{J}^{-1}] \mathbf{F}_x) \end{aligned} \quad (3.46)$$

Reemplazando el vector flujo escrito en coordenadas cartesianas \mathbf{F}_x y la matriz Jacobiana inversa $[\mathbf{J}^{-1}]$ según las ecuaciones 3.20 y 3.37, respectivamente, se obtiene:

$$\nabla_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{F} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial v_r} \\ \frac{\partial}{\partial v_\theta} \\ \frac{\partial}{\partial v_z} \end{bmatrix} \cdot \left(r \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\sin \theta}{r} & \frac{\cos \theta}{r} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -v_\theta \frac{\sin \theta}{r} & v_\theta \frac{\cos \theta}{r} & 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ v_r \frac{\sin \theta}{r} & -v_r \frac{\cos \theta}{r} & 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_x f \\ v_y f \\ v_z f \\ a_x f \\ a_y f \\ a_z f \end{bmatrix} \right) \quad (3.47)$$

Si se efectúa el producto matricial y se tienen en cuenta las relaciones 3.41, la expresión anterior se reduce a:

$$\nabla_{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{F} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial v_r} \\ \frac{\partial}{\partial v_\theta} \\ \frac{\partial}{\partial v_z} \end{bmatrix} \cdot \left(r \begin{bmatrix} v_r \\ \frac{v_\theta}{r} \\ v_z \\ a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \\ a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \\ a_z \end{bmatrix} f \right) \quad (3.48)$$

Expandir el producto interno en la Ec. 3.48 da una expresión para la divergencia del vector flujo de f escrita en términos del sistema de coordenadas cilíndricas dado por \mathbf{u}_r . Luego, si se sustituye la expresión resultante en la forma conservativa fuerte general (Ec. 3.13), se obtiene la ecuación de Vlasov en la forma de ley de conservación escrita en coordenadas cilíndricas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r f) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{v_\theta}{r} f \right) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z f) \\ + \frac{\partial}{\partial v_r} \left(\left[a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right] f \right) + \frac{\partial}{\partial v_\theta} \left(\left[a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \right] f \right) + \frac{\partial}{\partial v_z} (a_z f) = 0 \end{aligned} \quad (3.49)$$

A pesar de la importancia que tiene esta formulación conservativa, raramente se encuentra en la literatura, siendo la forma advectiva la más ampliamente utilizada. Llevar a cabo las derivadas en todos los términos de la Ec. 3.49 da:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{v_r}{r} f + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial f}{\partial z} \\ + \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_r} + \left(a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_\theta} - \frac{v_r}{r} f + a_z \frac{\partial f}{\partial v_z} = 0 \end{aligned} \quad (3.50)$$

donde aparecen dos términos que se cancelan mutuamente dando como resultado la forma de Liouville (Ec. 3.42).

Para conseguir la ecuación de Vlasov en la forma de ley de conservación débil (Ec. 3.12), se integra la forma fuerte (Ec. 3.49) sobre un diferencial de volumen del espacio de fases $d\Omega = r dr d\theta dz dv_r dv_\theta dv_z$. Ahora, el vector flujo puesto en función de las coordenadas cilíndricas es:

$$\mathbf{F}_r = \begin{bmatrix} v_r f \\ v_\theta f \\ v_z f \\ \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) f \\ \left(a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \right) f \\ a_z f \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

y los diferenciales de superficie en cada dirección están dados por:

$$d\sigma = \begin{bmatrix} rd\theta dz dv_r dv_\theta dv_z \\ dr dz dv_r dv_\theta dv_z \\ r dr d\theta dv_r dv_\theta dv_z \\ r dr d\theta dz dv_\theta dv_z \\ r dr d\theta dz dv_r dv_z \\ r dr d\theta dz dv_r dv_\theta \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

Las aceleraciones que aparecen en los flujos, debidas a la fuerza de Lorentz, se calculan de acuerdo con las ecuaciones 3.30. Como se mencionó anteriormente, los diferenciales de superficie y de volumen aumentan con la coordenada radial, a diferencia de la formulación en coordenadas cartesianas donde son constantes.

3.3. El modelo electromagnético

En las secciones anteriores hemos detallado las ecuaciones que describen la evolución temporal de las funciones de distribución correspondientes a un plasma de Vlasov, es decir, a un sistema cinético donde la dinámica está dominada por la interacción electromagnética de largo alcance y no por colisiones entre partículas. Sin embargo, no se han especificado las ecuaciones que gobiernan estas fuerzas de interacción.

Las aceleraciones que aparecen en la ecuación de Vlasov son debidas a la fuerza de Lorentz, es decir:

$$\mathbf{a} = \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (3.53)$$

donde los campos eléctrico \mathbf{E} y magnético \mathbf{B} son funciones de la posición y del tiempo. Esto significa, que para integrar la ecuación de Vlasov, es necesario conocer los campos electromagnéticos en todo el dominio físico. Notar que la Ec. 3.53 es válida cualquiera sea el sistema de coordenadas usado para escribir las componentes de los vectores \mathbf{a} , \mathbf{v} , \mathbf{E} y \mathbf{B} .

Los campos responsables de la aceleración \mathbf{a} corresponden a los campos totales, es decir, a la suma de los auto generados más los aplicados externamente, siendo los primeros los generados por las mismas partículas que componen el plasma. Con el fin de simplificar la notación, en adelante nos referiremos a los campos auto generados como \mathbf{E} y \mathbf{B} , pero a la hora de calcular las aceleraciones, es imprescindible no olvidarse de adicionar los campos externos, si los hubiera.

Dentro del marco de la teoría cinética de plasmas, las fuentes de los campos auto generados no son las partículas cargadas sino la densidad de carga $\rho(t, \mathbf{x})$ y la densidad de corriente $\mathbf{j}(t, \mathbf{x})$. Ambas son funciones de la posición y del tiempo, y se calculan a

partir de tomar momentos de la función de distribución en el espacio de velocidades de la siguiente manera:

$$\rho(t, \mathbf{x}) = \sum_s q_s \int f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (3.54)$$

$$\mathbf{j}(t, \mathbf{x}) = \sum_s q_s \int \mathbf{v} f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (3.55)$$

donde las sumatorias deben hacerse sobre todas las especies que compongan el plasma. La integral en la Ec. 3.54 se conoce como momento cero de f y da la densidad n_s de partículas de la especie s . La integral en la Ec. 3.55 se llama primer momento de f y da la densidad n_s multiplicada por la velocidad media que tienen las partículas en ese punto. Se destaca que las densidades de carga y corriente no son independientes entre sí, sino que deben satisfacer la ley de conservación de la carga eléctrica, la cual se expresa a través de la ecuación de compatibilidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (3.56)$$

El modelo más general para calcular los campos electromagnéticos a partir de las fuentes ρ y \mathbf{j} es el descrito por las ecuaciones de Maxwell, las cuales forman los cimientos del electromagnetismo clásico. No obstante, existen otros modelos simplificados como, por ejemplo, el extensamente empleado modelo electrostático descrito por la ecuación de Poisson. La elección del modelo más apropiado dependerá del problema particular que se pretenda resolver.

3.3.1. El sistema Vlasov-Maxwell

Se trata del sistema de ecuaciones más general para describir la cinética de plasmas no colisionales. Consiste de la ecuación de Vlasov (Ec. 3.8), la fuerza de Lorentz (Ec. 3.53), las expresiones integrales para las cargas y corrientes (Ecs. 3.54 y 3.55), y las ecuaciones de Maxwell. Estas últimas pueden formularse de manera integral o diferencial, siendo la segunda la más conocida (Jackson, 1999). A continuación, se escriben las cuatro ecuaciones de Maxwell en forma diferencial en el Sistema Internacional de Unidades (SI):

Ley de Gauss:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.57)$$

Ley de Gauss para el campo magnético:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3.58)$$

Ley de Faraday (ecuación de Maxwell-Faraday):

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (3.59)$$

Ley de Ampere (ecuación de Ampere-Maxwell):

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (3.60)$$

donde ϵ_0 es la permitividad eléctrica del vacío, μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío y c es la velocidad de la luz en el vacío. Por definición del metro, el valor de c es exactamente 299792458 m/s . El valor de μ_0 se determina experimentalmente y es aproximadamente $4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$. Por su parte, ϵ_0 se define a partir de las dos anteriores como $\epsilon_0 = 1/\mu_0 c^2 \text{ (F/m)}$.

3.3.2. El sistema Vlasov-Darwin

El modelo de Darwin es una aproximación de las ecuaciones de Maxwell introducido para eliminar los modos puramente electromagnéticos, cuyas escalas temporales están dadas por la velocidad de la luz, conservando los modos electrostáticos, magnetostáticos e inductivos (Bauer y Kunze, 2005; Fang et al., 2009; Schmitz y Grauer, 2006). Este modelo desacopla las ecuaciones de Maxwell al desprestigiar la componente solenoidal de la corriente de desplazamiento en la ecuación de Ampere. La principal ventaja de esta aproximación, es que las ecuaciones resultantes para los campos electromagnéticos exhiben un carácter elíptico, en lugar de hiperbólico, y pueden resolverse a partir de los momentos de la función de distribución, ahorrando los problemas asociados con la integración temporal de los campos.

La base de la aproximación de Darwin es descomponer al campo eléctrico \mathbf{E} en dos: una componente irrotacional \mathbf{E}_{irr} , con rotor nulo, y una componente solenoidal \mathbf{E}_{sol} , con divergencia nula. Esto es:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_{sol} + \mathbf{E}_{irr} \quad (3.61)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E}_{sol} = 0 \quad (3.62)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}_{irr} = 0 \quad (3.63)$$

Como el campo vectorial \mathbf{E}_{irr} es irrotacional, es posible definir una función ϕ , llamada potencial electrostático, de la siguiente manera:

$$\mathbf{E}_{irr} = -\nabla \phi \quad (3.64)$$

Luego, \mathbf{E}_{irr} se calcula inmediatamente resolviendo la ecuación de Poisson para el potencial ϕ , la que se desprende partir de la Ley de Gauss (Ec. 3.57):

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.65)$$

Ahora se desprecia la parte solenoidal de la corriente de desplazamiento, con lo cual la ecuación de Ampere (Ec. 3.60) resulta:

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}_{irr}}{\partial t} \quad (3.66)$$

Tomando el rotor de esta expresión, y teniendo en cuenta las Ecs. 3.58 y 3.63, se obtiene:

$$\nabla^2 \mathbf{B} = -\mu_0 \nabla \times \mathbf{j} \quad (3.67)$$

Notar que la ecuación anterior se puede escribir como tres ecuaciones de Poisson independientes, una para cada componente de \mathbf{B} . Para determinar \mathbf{E}_{sol} , se toma el rotor de la ecuación de Faraday (Ec. 3.59) y se usa la derivada temporal de la Ec. 3.66:

$$\nabla^2 \mathbf{E}_{sol} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_{irr}}{\partial t^2} \quad (3.68)$$

Finalmente, usando la derivada temporal de la Ley de Gauss (Ec. 3.57) y la Ley de conservación de la carga (Ec. 3.56), resulta:

$$\epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}_{irr}}{\partial t} + \mathbf{j}_{irr} = 0 \quad (3.69)$$

con lo cual la expresión 3.68 se reduce a:

$$\nabla^2 \mathbf{E}_{sol} = \mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}_{sol}}{\partial t} \quad (3.70)$$

donde se ha separado la densidad de corriente en dos componentes:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{irr} + \mathbf{j}_{sol} \quad (3.71)$$

3.3.3. El sistema Vlasov-cuasi-estático o Vlasov-Poiswell

Esta aproximación es aún menos general que la anterior ya que considera solamente los efectos electrostáticos y magnetostáticos, y fue introducida como una corrección al modelo Vlasov-Poisson (Besse et al., 2007; Masmoudi y Mauser, 2001). Para el cálculo de los campos electromagnéticos se introducen los potenciales asociados: el potencial eléctrico o potencial escalar ϕ , y el potencial magnético o potencial vectorial \mathbf{A} . Estos se definen a partir de los campos como:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (3.72)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3.73)$$

Una vez determinados los potenciales, los campos pueden calcularse a partir de estas expresiones. Las definiciones anteriores (Ecs. 3.72 y 3.73), no definen al potencial magnético unívocamente sino que se puede adicionar un campo irrotacional arbitrario a \mathbf{A} sin cambiar el valor de \mathbf{B} . Para que ambos potenciales queden bien definidos, se agrega una ecuación adicional o *gauge*, el cual puede elegirse libremente aprovechando el hecho de que los potenciales no son cantidades medibles ni tienen significado físico alguno, a diferencia de los campos. La ecuación adicional elegida es el llamado *gauge* de Lorentz:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (3.74)$$

Sustituyendo las definiciones de los potenciales en las ecuaciones de Maxwell, y empleando el *gauge* de Lorentz, se obtienen dos ecuaciones de onda, una escalar y otra vectorial:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nabla^2 \phi = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.75)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j} \quad (3.76)$$

El modelo cuasi-estático consiste en despreciar los términos que contienen las derivadas temporales en las Ecs. 3.75 y 3.76, dando como resultado el llamado sistema de Poisswell:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.77)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j} \quad (3.78)$$

Esta aproximación es razonable siempre que las velocidades características del problema que se quiera resolver sean mucho menores que la velocidad de la luz.

3.3.4. El sistema Vlasov-Poisson

Si en la fuerza de Lorentz (Ec. 3.53), el campo \mathbf{E} es mucho mayor que $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, y además, no existen campos magnéticos externos, los efectos magnéticos pueden despreciarse completamente. Por lo tanto, el problema de calcular las fuerzas se reduce a encontrar el campo eléctrico, lo cual se hace mediante la introducción del potencial electrostático y la ecuación de Poisson:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi$$

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Estas ecuaciones son el modelo más simplificado de los presentados aquí y representan el límite electrostático, es decir, el límite no relativista y sin efectos magnéticos, de las ecuaciones de Maxwell (Asano y Ukai, 1986; Jackson, 1999).

3.3.5. El sistema Vlasov-Ampere

Al igual que el modelo anterior, consiste en despreciar todo efecto magnético con la diferencia de que en vez de emplear la ecuación de Poisson para el cálculo del campo eléctrico, usa la ecuación de Ampere con campo magnético nulo:

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -c^2 \mu_0 \mathbf{j} \quad (3.79)$$

Si se toma la divergencia de la expresión anterior y se usa la ley de conservación de la carga, se recupera la ley de Gauss (Ec. 3.57). Una de las ventajas que presenta este modelo, es que se calcula el campo eléctrico directamente sin la necesidad de introducir los potenciales, además, no es necesario aplicar condiciones de borde para \mathbf{E} .

3.4. Propiedades de conservación del sistema Vlasov-Poisson

El sistema Vlasov-Poisson tiene ciertas propiedades de conservación a las cuales debe prestarse especial atención durante el desarrollo de métodos numéricos. Es deseable que estas cantidades teóricamente invariantes sean preservadas de la forma más acotada posible, y su evolución temporal puede usarse como parámetro para calificar la precisión de un esquema numérico o la validez de una simulación. Entre las propiedades de conservación clásicas encontramos:

- Conservación del máximo:

$$\begin{aligned} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) &\geq 0 \\ f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) &\leq \max_{\{\mathbf{x}, \mathbf{v}\}} [f(0, \mathbf{x}, \mathbf{v})] \\ \forall t &\geq 0 \end{aligned} \quad (3.80)$$

- Conservación de las normas L_p de f , para $1 \leq p < \infty$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} L_p [f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})] &= 0 \\ L_p [f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})] &= \|f\|_p = \left[\int_{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{v}} |f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})|^p d\mathbf{v} d\mathbf{x} \right]^{1/p} \end{aligned} \quad (3.81)$$

- Conservación de las partículas:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{v}} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} d\mathbf{x} = 0 \quad (3.82)$$

- Conservación de la cantidad de movimiento:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{v}} \mathbf{v} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} d\mathbf{x} = 0 \quad (3.83)$$

- Conservación de la energía:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\varepsilon_k + \varepsilon_E) &= 0 \\ \varepsilon_k &= \sum_s \frac{1}{2} m_s \int_{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{v}} v^2 f_s(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} d\mathbf{x} \\ \varepsilon_E &= \frac{1}{2} \epsilon_0 \int_{\mathbf{x}} E^2(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (3.84)$$

- Conservación de la entropía cinética:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbf{x}} \int_{\mathbf{v}} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) \ln [f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})] d\mathbf{v} d\mathbf{x} = 0 \quad (3.85)$$

Capítulo 4

Métodos numéricos para Vlasov-Poisson en coordenadas cartesianas

La atención del presente capítulo está restringida a la ecuación de Vlasov definida sobre un espacio de fases bidimensional (x, v) y escrita en coordenadas cartesianas. Además, se asume la dinámica del plasma en el límite electrostático, donde la fuerza de Lorentz depende solamente del campo eléctrico, el cual se describe por medio de la ecuación de Poisson. Si bien se trata de un caso particular muy simplificado, es el que más ha sido estudiado analíticamente y numéricamente.

Por comodidad, se reescriben las ecuaciones de gobierno particularizadas para este modelo:

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

$$a(t, x) = \frac{q}{m} E \quad (4.2)$$

$$E(t, x) = -\frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (4.4)$$

$$\rho(t, x) = \sum_s q_s \int f_s(t, x, v) dv \quad (4.5)$$

Se describirán, implementarán y compararán numerosos esquemas basados en diferencias finitas, semi-Lagrangianos, y de volúmenes finitos para discretizar y resolver la ecuación de Vlasov. No obstante, el esquema empleado para resolver la ecuación de Poisson, y obtener el campo electrostático, será el mismo en todos los casos.

Figura 4.1: Grilla uniforme para $x \in [x_0, x_{N-1}]$.

4.1. Esquema para la ecuación de Poisson 1D

A diferencia de la ecuación de Vlasov, la cual tiene carácter hiperbólico, la ecuación de Poisson (Ec. 4.4) es una ecuación en derivadas parciales de la clase elíptica. Esto está de acuerdo con la suposición de que, en el límite electrostático, los campos eléctricos se propagan con velocidad infinita y, como consecuencia, el valor de E (y de ϕ) en cada punto depende de la distribución de densidades de carga en la totalidad del dominio.

Los solvers de Poisson más usados en cinética de plasmas incluyen esquemas espectrales usando transformadas rápidas de Fourier (FFT) y esquemas de diferencias finitas, aunque también se han implementado discretizaciones en volúmenes finitos. En todos los solvers de Vlasov presentados en esta tesis, la ecuación de Poisson se resuelve mediante un esquema de diferencias finitas centradas por las siguientes razones: es simple de implementar, se puede extender fácilmente al orden deseado en el espacio y a espacios de mayor dimensión, y, a diferencia de los solvers espectrales, es aplicable a dominios no periódicos.

En primer lugar se define la discretización del dominio unidimensional $[x_0, x_{N-1}]$ donde se pretenden calcular los campos eléctricos. Se considera una malla o grilla numérica uniforme en el espacio y constante en el tiempo, compuesta por N nodos espaciados entre sí una distancia Δx (ver Fig. 4.1). Sea ϕ_i la aproximación numérica de $\phi(t, x)$ en el punto $x_i = x_0 + i\Delta x$ para $0 \leq i \leq N - 1$.

El principio de diferencias finitas se basa en aproximar, en cada nodo, la derivada que aparece en la ecuación de Poisson mediante fórmulas de diferencias finitas. Estas fórmulas se deducen expandiendo la función $\phi(t, x)$ en series de Taylor en x y conservando los términos de hasta el orden que se desee. El conjunto de los valores discretos necesarios para aproximar la derivada en cada punto es lo que se conoce como el *stencil* del esquema.

La aproximación en diferencias finitas centradas de segundo orden para la derivada segunda en la ecuación de Poisson es:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(t, x_i) = \frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (4.6)$$

Mientras que la misma aproximación pero de cuarto orden es:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(t, x_i) = \frac{-\phi_{i-2} + 16\phi_{i-1} - 30\phi_i + 16\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{12\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \quad (4.7)$$

Si se introduce la aproximación de cuarto orden de la derivada segunda (Ec. 4.7) en la

ecuación de Poisson se obtiene:

$$\frac{-\phi_{i-2} + 16\phi_{i-1} - 30\phi_i + 16\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{12\Delta x^2} = -\frac{\rho_i}{\epsilon_0} \quad (4.8)$$

donde se ha hecho $\rho_i = \rho(t, x_i)$. Notar que la expresión anterior solamente es válida para $i \in [2, N-3]$. Para determinar las incógnitas cercanas a las fronteras del dominio, será necesario aplicar condiciones de borde, las cuales pueden ser de Dirichlet, de Neumann, o periódicas. El conjunto de las $N-4$ ecuaciones 4.8 correspondientes a cada uno de los puntos internos del dominio, más las 4 ecuaciones correspondientes a las condiciones de borde, proporcionan un sistema de N ecuaciones lineales con N incógnitas.

Como los problemas de pruebas que se resolverán más adelante usan, por simplicidad, condiciones de borde periódicas, mostramos cómo queda expresado el sistema de ecuaciones en este caso particular. Cuando el dominio es periódico, se hace $x_0 = x_{N-1}$ y todos los puntos pueden pensarse como interiores. Las ecuaciones para los puntos cercanos a la frontera son:

$$\begin{aligned} \frac{-\phi_{N-3} + 16\phi_{N-2} - 30\phi_0 + 16\phi_1 - \phi_2}{12\Delta x^2} &= -\frac{\rho_0}{\epsilon_0} \\ \frac{-\phi_{N-2} + 16\phi_0 - 30\phi_1 + 16\phi_2 - \phi_3}{12\Delta x^2} &= -\frac{\rho_1}{\epsilon_0} \\ \frac{-\phi_{N-5} + 16\phi_{N-4} - 30\phi_{N-3} + 16\phi_{N-2} - \phi_0}{12\Delta x^2} &= -\frac{\rho_{N-3}}{\epsilon_0} \\ \frac{-\phi_{N-4} + 16\phi_{N-3} - 30\phi_{N-2} + 16\phi_0 - \phi_1}{12\Delta x^2} &= -\frac{\rho_{N-2}}{\epsilon_0} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Luego, el sistema de ecuaciones resultante puede escribirse en forma matricial como:

$$\frac{1}{12\Delta x^2} \begin{bmatrix} -30 & 16 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 16 \\ 16 & -30 & 16 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 16 & -30 & 16 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 16 & -30 & 16 & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 16 & -30 & 16 \\ 16 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 16 & -30 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \phi_{N-4} \\ \phi_{N-3} \\ \phi_{N-2} \end{bmatrix} = -\frac{1}{\epsilon_0} \begin{bmatrix} \rho_0 \\ \rho_1 \\ \rho_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \rho_{N-4} \\ \rho_{N-3} \\ \rho_{N-2} \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

Desafortunadamente se verifica fácilmente que esta matriz es singular y, por lo tanto, no es invertible. Una forma de reparar esto, es agregar una ecuación adicional que imponga un valor promedio nulo de los potenciales, esto es:

$$\sum_i \phi_i = 0 \quad (4.11)$$

Sin embargo, como agregar cualquier valor constante a la distribución de potenciales no modifica el valor del campo eléctrico, aquí se opta por una solución aún más simple que es fijar el valor de $\phi_0 = 0$ y, consecuentemente, $\phi_{N-1} = 0$. El sistema corregido queda:

$$\frac{1}{12\Delta x^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 16 & -30 & 16 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 16 & -30 & 16 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 16 & -30 & 16 & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 16 & -30 & 16 \\ 16 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 16 & -30 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \phi_{N-4} \\ \phi_{N-3} \\ \phi_{N-2} \end{bmatrix} = -\frac{1}{\epsilon_0} \begin{bmatrix} 0 \\ \rho_1 \\ \rho_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \rho_{N-4} \\ \rho_{N-3} \\ \rho_{N-2} \end{bmatrix} \tag{4.12}$$

Para la resolución del sistema de ecuaciones lineales anterior puede usarse cualquier técnica numérica estándar como eliminación de Gauss, Jacobi, Gauss-Seidel o SOR. Como la matriz de coeficientes es constante, aquí se opta por hacer una descomposición LU de la matriz al principio de la simulación, y luego usar las matrices triangulares inferior y superior para calcular los potenciales en cada paso de tiempo.

Una vez obtenidos los potenciales, se determinan los valores del campo electrostático a partir de la definición del potencial (Ec. 4.3). Nuevamente, se aproxima la derivada por una fórmula de diferencias finitas centradas de cuarto orden:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(t, x_i) = \frac{8(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+2} - \phi_{i-2})}{12\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \tag{4.13}$$

Sustituyendo la aproximación 4.13 en la ecuación 4.3 se obtiene la expresión para calcular el campo eléctrico en cada punto de la grilla numérica:

$$E_i = -\frac{8(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+2} - \phi_{i-2})}{12\Delta x} \tag{4.14}$$

donde se ha denotado como E_i a la aproximación numérica de $E(t, x_i)$.

4.2. La técnica de Splitting

La ecuación de Vlasov bidimensional en su forma de Liouville (4.1) es una ecuación advectiva en dos direcciones 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 $x-v$). La técnica de splitting, aplicada a este caso particular, consiste en descomponer la evolución temporal de la función de distribución en dos advecciones separadas no simultáneas, una en la dirección de x y otra en la dirección de v . Suele encontrarse bajo el nombre de

separación o splitting dimensional, separación temporal, o separación de operadores.

Este enfoque ha sido aplicado ampliamente en los códigos semi-Lagrangianos, tanto advection como conservativos, ya que simplifica inmensamente las etapas de determinación del origen de las características y de interpolación o reconstrucción, como veremos más adelante.

La primera etapa de la Ec. 4.1 separada se escribe:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (4.15)$$

con v constante, y la segunda es:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + a(t, x) \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (4.16)$$

con x constante. La gran ventaja que proporciona esta técnica al aplicarse a la ecuación de Vlasov en el límite 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 (4.16) respecto de v sobre todo el espacio de velocidades, se obtiene:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + a \frac{\partial f}{\partial v} \right) dv \\ 0 &= \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} f dv + a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial v} dv \\ 0 &= \frac{\partial \rho}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde la segunda integral es nula dado que la función de distribución tiende a 0 para valores muy grandes de v . Esto significa, que avanzar en el tiempo la ecuación 4.16 no modifica la densidad de carga ρ (y consecuentemente tampoco el campo eléctrico E), a pesar de modificar los valores de f .

El inconveniente del splitting es que introduce un error en la integración temporal. Para analizar este error, se considera la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{du}{dt} = Au + Bu = (A + B)u \quad (4.18)$$

siendo A y B dos operadores diferenciales cualesquiera. La ecuación (4.18) dividida será:

$$\frac{du}{dt} = Au, \quad \frac{du}{dt} = Bu \quad (4.19)$$

La solución formal de las ecuaciones (4.19), resueltas sucesivamente, sólo será igual a la de la ecuación (4.18) si los operadores A y B conmutan, esto es, si $B(Au) = A(Bu)$. En este caso, se dice que el splitting es exacto. Volviendo a la ecuación de Vlasov, los operadores:

$$v \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{y} \quad a(t, x) \frac{\partial}{\partial v} \quad (4.20)$$

no conmutan, debido que su conmutador es no nulo:

$$\begin{aligned} \left[v \frac{\partial}{\partial x}, a \frac{\partial}{\partial v} \right] &= v \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial}{\partial v} \right) - a \frac{\partial}{\partial v} \left(v \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= v \frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial}{\partial v} - a \frac{\partial}{\partial x} \\ &\neq 0! \end{aligned} \quad (4.21)$$

Esto implica que resolver sucesivamente las ecuaciones 4.15 y 4.16, en lugar de la Ec. 4.1, introduce cierto error. Una forma de reducir dicho error, es resolviendo primero la ecuación 4.15 por medio paso de tiempo, luego la ecuación 4.16 un paso de tiempo completo, y nuevamente la 4.15 otro medio paso de tiempo. Esta técnica se conoce como splitting de *Strang*, e introduce un error local en el tiempo de orden 3, y global de orden 2 (LeVeque, 2002; Strang, 1968).

4.3. Integración temporal

Los métodos llamados aquí como semi discretos consisten en discretizar la ecuación de Vlasov en el espacio de fases mediante algún método de discretización basado en volúmenes finitos o diferencias finitas, obteniendo un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que debe ser integrado en el tiempo. Para cada punto (x, v) del espacio de fases, la Ec. 4.1 discretizada se puede expresar como una ODE de la forma:

$$\dot{f} = rhs(t, f) \quad (4.22)$$

Si bien no se ha indicado, el lado derecho (*rhs*) puede depender explícitamente de las variables independientes x y v . Antes de resolver numéricamente esta ecuación, es necesaria una discretización temporal de la función de distribución. Se denota como f^n a la aproximación numérica de f en el instante de tiempo $t^n = n\Delta t$.

Existen numerosas familias de métodos, explícitos e implícitos, para la resolución de ecuaciones diferenciales ordinarias. Entre los más usados, encontramos métodos con etapas intermedias del tipo Runge-Kutta y métodos de múltiples etapas del tipo Adams-Bashforth.

4.3.1. Métodos Runge-Kutta

Son una familia de métodos iterativos, explícitos e implícitos, que se basan en calcular el lado derecho de la Ec. 4.22 en etapas intermedias dentro de un mismo paso de tiempo para dar como resultado un esquema de orden superior (Atkinson, 1989; Butcher, 2008; Press, 2007).

El miembro más conocido y extensamente usado de esta familia es el Runge-Kutta explícito de cuarto orden, llamado comúnmente RK4, el cual consiste de cuatro etapas y permite aproximar la función de distribución en el tiempo $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ de la siguiente forma:

$$f^{n+1} = f^n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (4.23)$$

siendo:

$$\begin{aligned} k_1 &= rhs(t^n, f^n) \\ k_2 &= rhs\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, f^n + \frac{\Delta t}{2}k_1\right) \\ k_3 &= rhs\left(t^n + \frac{\Delta t}{2}, f^n + \frac{\Delta t}{2}k_2\right) \\ k_4 &= rhs(t^n + \Delta t, f^n + \Delta tk_3) \end{aligned} \quad (4.24)$$

El inconveniente que presenta esta familia de métodos es su elevado costo computacional intrínseco, ya que requiere la evaluación del lado derecho en cada una de las etapas intermedias. Esto significa que todo el trabajo numérico asociado con la discretización espacial, incluida la resolución de la ecuación de Poisson, debe realizarse cuatro veces por cada paso de tiempo.

4.3.2. Métodos Adams-Bashforth

Los métodos lineales de múltiples etapas (*linear multistep methods*) son una familia de métodos, explícitos e implícitos, que consiguen órdenes superiores al usar información sobre los pasos de tiempo anteriores. Los métodos del tipo Runge-Kutta, como el RK4, descartan toda información previa una vez avanzado un paso de tiempo. Por el contrario, los métodos de múltiples etapas conservan la información de un cierto número de pasos anteriores con el fin de ganar eficiencia.

Los miembros explícitos de esta familia suelen llamarse métodos de Adams-Bashforth (Butcher, 2008; Hairer et al., 2009), de los cuales, el de cuarto orden se escribe:

$$\begin{aligned} f^{n+1} = f^n + \frac{\Delta t}{24} [&55 rhs(t^n, f^n) - 59 rhs(t^{n-1}, f^{n-1}) \\ &+ 37 rhs(t^{n-2}, f^{n-2}) - 9 rhs(t^{n-3}, f^{n-3})] \end{aligned} \quad (4.25)$$

Notar que no es posible usar el esquema anterior desde el principio de la simulación ya que no se tiene información previa suficiente. Una alternativa es empezar con el método de Euler de primer orden, y luego los Adams-Bashforth de segundo y tercer orden en el tiempo:

$$f^{n+1} = f^n + \Delta t \text{ rhs}(t^n, f^n) \quad (4.26)$$

$$f^{n+1} = f^n + \frac{\Delta t}{2} [3 \text{ rhs}(t^n, f^n) - 1 \text{ rhs}(t^{n-1}, f^{n-1})] \quad (4.27)$$

$$f^{n+1} = f^n + \frac{\Delta t}{12} [23 \text{ rhs}(t^n, f^n) - 15 \text{ rhs}(t^{n-1}, f^{n-1}) + 5 \text{ rhs}(t^{n-2}, f^{n-2})] \quad (4.28)$$

La otra alternativa es empezar con métodos de etapas intermedias como los del tipo Runge-Kutta.

Si bien el integrador temporal definido por la Ec. 4.25 ahorra el costo computacional relacionado con calcular los lados derechos en etapas intermedias, requiere el almacenamiento de las funciones de distribución y/o los lados derechos de pasos de tiempo anteriores en la memoria. Esto podría significar una desventaja en relación con los esquemas como el dado por las Ecs. 4.23 - 4.24 cuando el costo de calcular los lados derechos es relativamente bajo, o en sistemas limitados por el ancho de banda de memoria.

4.4. Esquemas de diferencias finitas

Ahora enfocaremos nuestra atención en aquellos métodos que nos permitirán resolver numéricamente la ecuación de Vlasov, independientemente de la técnica que se use para determinar el campo eléctrico. Las soluciones numéricas que se persiguen no son funciones analíticas que aproximen a la función de distribución sobre todo el espacio de fases y en todo tiempo, sino que se buscan soluciones discretas que aproximen $f(t, x, v)$ en determinados puntos del dominio llamados nodos y en instantes de tiempo preestablecidos. La colección de todos estos nodos define lo que se llama malla o grilla numérica. Un ejemplo de la grilla empleada para resolver la ecuación de Vlasov bidimensional en coordenadas cartesianas se ilustra en la Fig. 4.2.

Los métodos de diferencias finitas (FD) 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 en el tiempo y uniformes en el espacio, 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 $t^n = n\Delta t$.

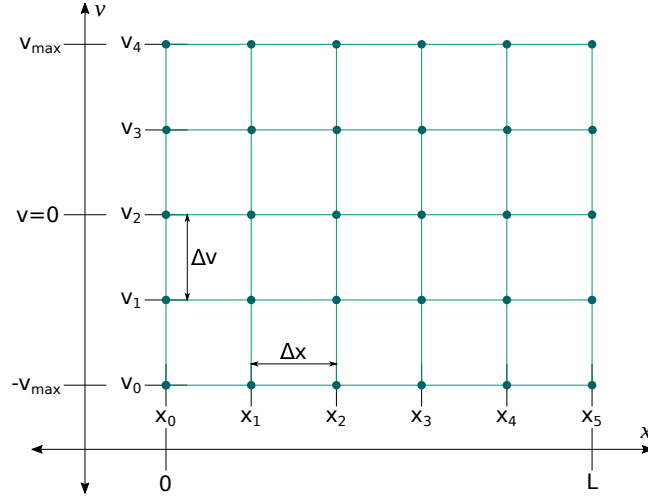


Figura 4.2: Ejemplo de grilla estructurada uniforme para $x \in [0, L]$ y $v \in [-v_{max}, v_{max}]$, con $N_x = 6$ y $N_v = 5$.

4.4.1. Lax-Friedrichs

Derivado a partir del famoso método inestable *Forward-Time Centered-Space* (FTCS), el esquema de Lax-Friedrichs completamente discreto (Toro, 2009), aplicado a la ecuación de Vlasov (4.1), se escribe:

$$f_{i,k}^{n+1} = \frac{1}{2} (f_{i+1,k}^n + f_{i-1,k}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} v_k (f_{i+1,k}^n - f_{i-1,k}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta v} a_i^n (f_{i,k+1}^n + f_{i,k-1}^n) \quad (4.29)$$

La Ec. 4.29 puede pensarse como el esquema FTCS con un término adicional de viscosidad artificial. El método de Lax-Friedrichs es explícito, de primer orden en el espacio y de primer orden en el tiempo, lo cual lo hace muy disipativo y poco útil.

4.4.2. Lax-Friedrichs (con splitting)

Se aplica el esquema de Lax-Friedrichs (Ec. 4.29) a cada una de las ecuaciones unidimensionales 4.15 y 4.16, separadas según la técnica del splitting de Strang (Strang, 1968):

$$f_{i,k}^* = \frac{1}{2} (f_{i+1,k}^n + f_{i-1,k}^n) - \frac{\Delta t}{4\Delta x} v_k (f_{i+1,k}^n - f_{i-1,k}^n) \quad (4.30)$$

$$f_{i,k}^{**} = \frac{1}{2} (f_{i,k+1}^* + f_{i,k-1}^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta v} a_i^* (f_{i,k+1}^* + f_{i,k-1}^*) \quad (4.31)$$

$$f_{i,k}^{n+1} = \frac{1}{2} (f_{i+1,k}^{**} + f_{i-1,k}^{**}) - \frac{\Delta t}{4\Delta x} v_k (f_{i+1,k}^{**} - f_{i-1,k}^{**}) \quad (4.32)$$

Notar que primero se ha aplicado el esquema a la ecuación 4.15 por $\Delta t/2$, luego a la ecuación 4.16 por Δt , y finalmente a la 4.15 nuevamente por $\Delta t/2$. Como el esquema de

Lax-Friedrichs usado en cada etapa tiene un error local de orden 2 en el tiempo, el splitting de Strang no introduce error adicional.

4.4.3. 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 (LeVeque, 1992), esto es:

$$f_{i,k}^{n+1} = f_{i,k}^n + \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{i,k}^n \Delta t + \left[\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right]_{i,k}^n \frac{\Delta t^2}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (4.33)$$

Luego, las derivadas temporales se escriben en función de derivadas espaciales usando la ecuación de Vlasov. El esquema resultante es:

$$\begin{aligned} f_{i,k}^{n+1} &= f_{i,k}^n - \Delta t v_k \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n - \Delta t a_i^n \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^n \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} v_k^2 \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^n + \frac{\Delta t^2}{2} [a^2]_i^n \left[\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right]_{i,k}^n \\ &+ \Delta t^2 v_k a_i^n \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial v} \right]_{i,k}^n - \left[\frac{\partial a}{\partial t} \right]_i^n \frac{\Delta t^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^n \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} v_k \left[\frac{\partial a}{\partial x} \right]_i^n \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^n + \frac{\Delta t^2}{2} a_i^n \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n \end{aligned} \quad (4.34)$$

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

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n &= \frac{f_{i+1,k}^n - f_{i-1,k}^n}{2\Delta x} \\ \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^n &= \frac{f_{i+1,k}^n - 2f_{i,k}^n + f_{i-1,k}^n}{\Delta x^2} \\ \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial v} \right]_{i,k}^n &= \frac{f_{i+1,k+1}^n - f_{i+1,k-1}^n + f_{i-1,k-1}^n - f_{i-1,k+1}^n}{4\Delta x \Delta v} \end{aligned} \quad (4.35)$$

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 (Ec. 4.4):

$$\left[\frac{\partial a}{\partial x} \right]_i^n = \frac{q}{m} \left[\frac{\partial E}{\partial x} \right]_i^n = \frac{q}{m} \frac{\rho_i^n}{\epsilon_0} \quad (4.36)$$

Mientras que la derivada temporal de $a(t, x)$ se aproxima mediante una diferencia finita hacia atrás en el tiempo de primer orden:

$$\left[\frac{\partial a}{\partial t} \right]_i^n = \frac{a_i^n - a_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.37)$$

Este método es explícito y de segundo orden, tanto en el espacio como en el tiempo.

4.4.4. Lax-Wendroff (Richtmyer de dos etapas)

Esta variante se obtiene partiendo de puntos intermedios en el espacio, y avanzando la ecuación diferencial hasta un paso intermedio en el tiempo mediante el esquema de Lax. Luego, se aplica un esquema de tipo Leapfrog por un paso completo pero centrado en este tiempo intermedio. Tiene la ventaja de que no aparecen los términos cruzados presentes en la formulación anterior (Ec. 4.34).

a. Medio paso, Lax:

$$f_{i+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (f_{i+1,k}^n + f_{i,k}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} v_k (f_{i+1,k}^n - f_{i,k}^n) - \frac{\Delta t}{4\Delta v} \left(\frac{a_i^n + a_{i+1}^n}{2} \right) \left(\frac{f_{i,k+1}^n + f_{i+1,k+1}^n}{2} - \frac{f_{i,k-1}^n + f_{i+1,k-1}^n}{2} \right) \quad (4.38)$$

$$f_{i,k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (f_{i,k}^n + f_{i,k-1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta v} a_i^n (f_{i,k}^n - f_{i,k-1}^n) - \frac{\Delta t}{4\Delta x} \left(\frac{v_k + v_{k-1}}{2} \right) \left(\frac{f_{i+1,k}^n + f_{i+1,k-1}^n}{2} - \frac{f_{i-1,k}^n + f_{i-1,k-1}^n}{2} \right) \quad (4.39)$$

De la misma forma se consiguen las fórmulas para $f_{i-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}$ y $f_{i,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$.

b. Paso completo, Leapfrog:

$$f_{i,k}^{n+1} = f_{i,k}^{n-1} - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_k \left(f_{i+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta v} a_i^{n+\frac{1}{2}} \left(f_{i,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - f_{i,k-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) \quad (4.40)$$

donde el valor de $a_i^{n+\frac{1}{2}}$ se calcula resolviendo la ecuación de Poisson, con las densidades de carga dadas por la integración en v del promedio entre $f_{i+\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}$ y $f_{i-\frac{1}{2},k}^{n+\frac{1}{2}}$.

4.4.5. 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 (Horne y Freeman, 2001).

a. Predictor:

$$f_{i,k}^* = f_{i,k}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_k (f_{i+1,k}^n - f_{i,k}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta v} a_i^n (f_{i,k+1}^n - f_{i,k}^n) \quad (4.41)$$

b. Corrector

$$f_{i,k}^{n+1} = \frac{1}{2} (f_{i,k}^n + f_{i,k}^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} v_k (f_{i,k}^* - f_{i-1,k}^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta v} a_i^* (f_{i,k}^* - f_{i,k-1}^*) \quad (4.42)$$

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, es decir:

a. Predictor:

$$f_{i,k}^* = f_{i,k}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_k (f_{i,k}^n - f_{i-1,k}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta v} a_i^n (f_{i,k}^n - f_{i,k-1}^n) \quad (4.43)$$

b. Corrector

$$f_{i,k}^{n+1} = \frac{1}{2} (f_{i,k}^n + f_{i,k}^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} v_k (f_{i+1,k}^* - f_{i,k}^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta v} a_i^* (f_{i,k+1}^* - f_{i,k}^*) \quad (4.44)$$

A través de experimentos numéricos, se ha visto que los mejores resultados se obtienen usando en las etapas del predictor y corrector, respectivamente, diferencias hacia adelante y atrás en un paso de tiempo, y hacia atrás y adelante en el paso de tiempo siguiente. Esto es, por ejemplo, usando las Ecs. 4.41 y 4.42 si n es impar, y las Ecs. 4.43 y 4.44 si n es par.

4.4.6. Lax-Wendroff (con splitting)

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

$$f_{i,k}^* = f_{i,k}^n - \frac{\Delta t}{2} v_k \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^n + \frac{\Delta t^2}{8} v_k^2 \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^n \quad (4.45)$$

$$f_{i,k}^{**} = f_{i,k}^* - \Delta t a_i^* \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i,k}^* + \frac{\Delta t^2}{2} [a^2]_i^* \left[\frac{\partial^2 f}{\partial v^2} \right]_{i,k}^* \quad (4.46)$$

$$f_{i,k}^{n+1} = f_{i,k}^{**} - \frac{\Delta t}{2} v_k \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k}^{**} + \frac{\Delta t^2}{8} v_k^2 \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right]_{i,k}^{**} \quad (4.47)$$

donde a_i^* se calcula resolviendo la ecuación de Poisson a partir del valor intermedio $f_{i,k}^*$. Las derivadas espaciales en las ecuaciones 4.45 - 4.47 se calculan de acuerdo con las fórmulas 4.35.

La ventaja que tiene esta formulación por sobre la bidimensional completa (Ec. 4.34), es que no aparece ninguno de los términos cruzados. La desventaja, es que introduce un error intrínseco al splitting, ya que tanto el esquema de Lax-Wendroff como el splitting de Strang tienen un error local de orden 3 en el tiempo. No obstante, el método global sigue siendo de segundo orden tanto en el espacio como en el tiempo.

4.5. Esquemas semi-Lagrangianos advectivos

Los métodos denominados como semi Lagrangianos (SL) son, después de los PIC, los más extensamente utilizados para la solución de la ecuación de Vlasov. Computacionalmente, esta familia de métodos es mucho más intensiva que los PIC, lo cual los hace especialmente útiles para el estudio de problemas de dimensión reducida, en especial, de problemas con una o dos dimensiones espaciales, más una o dos dimensiones de velocidad.

Aprovechando el hecho de que los valores de la función escalar $f(t, x, v)$ se conservan a lo largo de las curvas características de la ecuación hiperbólica de Vlasov, estos métodos actualizan el valor de la función de distribución en cada nodo siguiendo dichas características en el tiempo. Actualmente, los métodos SL existen de diferentes clases: hacia atrás o hacia adelante, basados en valores puntuales o en celdas (volúmenes finitos), con o sin splitting dimensional. En esta sección vamos a describir brevemente a los basados en nodos, con splitting, y que siguen las características hacia atrás.

Hallar el origen de las curvas características que desembocan en los nodos de la grilla no es, normalmente, una tarea trivial, a menos de que se trate de advecciones a coeficientes constantes. En los casos donde la velocidad de advección es constante, el origen de las características se computa de manera exacta, pero en el caso contrario, es necesario usar algún solver para ecuaciones diferenciales ordinarias o algún otro método numérico para problemas de punto fijo, como la iteración de Newton o Picard.

En general, el origen de las características no coincide exactamente con ningún nodo, por lo que es preciso interpolar el valor buscado de f a partir de los valores nodales conocidos. Las curvas de interpolación empleadas en este trabajo son: polinomios de tercer grado en la forma de Lagrange, polinomios cúbicos de Hermite con aproximación de las derivadas primeras (Crouseilles et al., 2008, 2014), y splines cúbicos (Cheng y Knorr, 1976; Sonnendrücker et al., 1999).

Determinación del origen de las características:

La función de distribución $f(t, x, v)$ es constante a lo largo de las curvas características, esto es:

$$f(t^{n+1}, x, v) = f[t^n, X(t^n; t^{n+1}, x, v), V(t^n; t^{n+1}, x, v)] \quad (4.48)$$

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 ordinarias que define a las curvas características de la ecuación de Vlasov (Ec. 4.1). Si escribimos la ecuación de Vlasov en su forma de Liouville como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + [v, a(t, x)] \cdot \nabla f = 0 \quad (4.49)$$

entonces el sistema de ODEs que define las curvas características asociadas con la Ec. 4.49 se puede expresar:

$$\frac{d}{dt}(X, V) = (V(t), a[t, X(t)]) \quad (4.50)$$

o, más explícitamente:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= V(t) \\ \frac{dV}{dt} &= a[t, X(t)] \end{aligned} \quad (4.51)$$

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:

$$\begin{aligned} X(t^n; t^{n+1}, x, v) &= x - v\Delta t \\ V(t^n; t^{n+1}, x, v) &= v - a(t^*, x)\Delta t \end{aligned} \quad (4.52)$$

donde 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, y usando las ecuaciones 4.48 y 4.52, el algoritmo para propagar f desde el tiempo t^n hasta el t^{n+1} se escribe:

$$f_{i,k}^* = f^n \left(x_i - v_k \frac{\Delta t}{2}, v_k \right) \quad (4.53)$$

$$f_{i,k}^{**} = f^* (x_i, v_k - a_i^* \Delta t) \quad (4.54)$$

$$f_{i,k}^{n+1} = f^{**} \left(x_i - v_k \frac{\Delta t}{2}, v_k \right) \quad (4.55)$$

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 Ec. 4.54. Entonces, a_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 los métodos SL 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:

$$\begin{aligned} |v_{max}| \Delta t &\leq \Delta x \\ |a_{max}| \Delta t &\leq \Delta v \end{aligned} \quad (4.56)$$

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:

$$\begin{aligned} [x_{i-1}, x_i] & \text{ si } v_k > 0 \\ [x_i, x_{i+1}] & \text{ si } v_k < 0 \end{aligned} \quad (4.57)$$

Interpolarse el valor de $X(t^n; t^{n+1}, x_i, v_k)$ dentro del intervalo correspondiente en función de los valores nodales, requiere del empleo de técnicas de interpolación unidimensionales, de las cuales, se introducen a continuación algunas de las más usadas.

4.5.1. 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:

$$L_n(x_i) = f_i \quad (4.58)$$

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:

$$\{x_{j-1}, x_j, x_{j+1}, x_{j+2}\} \quad (4.59)$$

y se puede expresar en la forma de Lagrange como:

$$L_3(x) = \sum_{i=j-1}^{j+2} f_i \ell_i(x) \quad (4.60)$$

donde las funciones $\ell_i(x)$ son los polinomios de base de Lagrange cúbicos definidos sobre los puntos (4.59). El inconveniente de este tipo de interpolación es que, en general, no se obtienen derivadas continuas de un intervalo a otro, pero tiene la ventaja de ser fácil de

implementar y barato computacionalmente.

4.5.2. Interpolación cúbica en forma de Hermite

Dados los conjuntos de valores (x_i, f_i, f'_i) y $(x_{i+1}, f_{i+1}, f'_{i+1})$, donde f'_i denota a la derivada de f respecto de x en el punto x_i , existe un único polinomio H_3 de grado 3 que satisface las condiciones:

$$\begin{aligned} H_3(x_i) &= f_i \\ H_3(x_{i+1}) &= f_{i+1} \\ H'_3(x_i) &= f'_i \\ H'_3(x_{i+1}) &= f'_{i+1} \end{aligned} \tag{4.61}$$

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

$$\begin{aligned} H_3(x) &= h_{00}(\xi) f_i + h_{01}(\xi) f_{i+1} \\ &+ \Delta x [h_{10}(\xi) f'_i + h_{11}(\xi) f'_{i+1}] \end{aligned} \tag{4.62}$$

siendo el parámetro:

$$\xi = \frac{x - x_i}{\Delta x} \tag{4.63}$$

y las funciones:

$$\begin{aligned} h_{00}(\xi) &= 2\xi^3 - 3\xi^2 + 1 \\ h_{01}(\xi) &= -2\xi^3 + 3\xi^2 \\ h_{10}(\xi) &= \xi^3 - 2\xi^2 + \xi \\ h_{11}(\xi) &= \xi^3 - \xi^2 \end{aligned} \tag{4.64}$$

Encontrar este polinomio en cada intervalo que compone el dominio, 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:

$$f'_i = \frac{1}{2\Delta x} (f_{i+1} - f_{i-1}) \tag{4.65}$$

y de cuarto orden:

$$f'_i = \frac{1}{12\Delta x} [8(f_{i+1} - f_{i-1}) - (f_{i+2} - f_{i-2})] \tag{4.66}$$

4.5.3. 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 (De Boor, 2001; Milovanović y Udovičić, 2010; Wang et al., 2011).

La desventaja de esta técnica es que la aproximación no es local, sino que la función de interpolación en cada intervalo depende de los valores de la función de distribución en todos los puntos del dominio. Como consecuencia, en cada etapa de interpolación unidimensional, se requiere la resolución de un sistema de ecuaciones lineales para determinar los coeficientes que multiplican a las funciones de base llamadas *B-splines*. Este inconveniente se ve aliviado por el hecho de que el sistema de ecuaciones resultantes es muy disperso debido al soporte compacto de los B-splines. Se destaca que, además de cumplir con tantas condiciones de interpolación como nodos, la función interpolante debe satisfacer dos condiciones de borde que dependen del problema a resolver.

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 (4.62 - 4.64), pero con la siguiente condición para las derivadas primeras:

$$f'_{i-1} + 4f'_i + f'_{i+1} = \frac{3}{\Delta x} (f_{i+1} - f_{i-1}) \quad (4.67)$$

Si el número de nodos es $n + 1$, la Ec. 4.67 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 las llamadas naturales ($f''_0 = f''_n = 0$). Estas últimas implican:

$$\begin{aligned} 2f'_0 + f'_1 &= \frac{3}{\Delta x} (f_1 - f_0) \\ 2f'_n + f'_{n-1} &= \frac{3}{\Delta x} (f_n - f_{n-1}) \end{aligned} \quad (4.68)$$

Cuando las condiciones de borde son periódicas, como es el caso de los problemas de prueba que se simularán en el capítulo siguiente, el sistema de ecuaciones lineales a resolver para aproximar las $n + 1$ derivadas primeras puede escribirse de manera matricial

como sigue:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 4 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f'_0 \\ f'_1 \\ f'_2 \\ \vdots \\ f'_{n-2} \\ f'_{n-1} \\ f'_n \end{bmatrix} = \frac{3}{\Delta x} \begin{bmatrix} f_1 - f_{n-1} \\ f_2 - f_0 \\ f_3 - f_1 \\ \vdots \\ f_{n-1} - f_{n-3} \\ f_0 - f_{n-2} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.69)$$

4.6. Esquemas semi-Lagrangianos conservativos

Los métodos semi-Lagrangianos advectivos (SL) descritos en la sección anterior resuelven la forma no conservativa o primitiva de la ecuación de Vlasov (4.1). Alternativamente, es posible formular esquemas semi-Lagrangianos que resuelvan la forma conservativa derivada en la Sección 3.2.3.

Estos métodos, llamados SL conservativos, han despertado un gran interés en la últimas décadas gracias que presentan ciertas ventajas por sobre su contraparte advectiva. Además de su inherente propiedad de conservación de la cantidad de partículas, admiten la aplicación de limitadores de pendiente en la reconstrucción con el fin de asegurar otras propiedades como la positividad y la monotonicidad. Además, como resuelven la forma conservativa de la ecuación de Vlasov, los problemas multi dimensionales pueden reducirse de manera exacta a una sucesión de problemas unidimensionales mediante la técnica de splitting.

Se ha demostrado que en el caso especial del sistema Vlasov-Poisson con splitting direccional, donde las advecciones son a coeficientes constantes, los esquemas advectivo y conservativo son equivalentes (Crouseilles et al., 2009). En los casos con velocidades de advección no constantes, aplicar la técnica de splitting a la forma advectiva puede conducir a malas propiedades de conservación, especialmente para tiempos de simulación largos.

El esquema SL conservativo está basado en el método de los volúmenes finitos, con la diferencia de que el cálculo de los flujos entrantes y salientes de una celda se realiza por integración de la función de distribución sobre el volumen ocupado, en el paso de tiempo anterior, por las partículas que atravesaron las fronteras de la celda.

La ecuación de Vlasov bidimensional (x, v) en forma conservativa se escribe:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(vf) + \frac{\partial}{\partial v}(af) = 0 \quad (4.70)$$

Al aplicar la técnica de splitting dimensional, el problema se reduce a la resolución sucesiva

de las siguientes ecuaciones en la forma de leyes de conservación unidimensionales:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (vf) = 0 \quad (4.71)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial v} (af) = 0 \quad (4.72)$$

donde la primera (Ec. 4.71) se resuelve con v constante, y la segunda (Ec. 4.72) con $a(t, x)$ constante. Vamos a describir brevemente la discretización, la reconstrucción y el cálculo de los flujos para la resolución de la Ec. 4.71, teniendo en mente que el proceso para la segunda es completamente análogo.

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. En un instante de tiempo t dado, se define a esta cantidad promedio como:

$$\bar{f}(t, x, v) = \frac{1}{\Delta x} \int_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} f(t, x + h, v) dh \quad (4.73)$$

Por su parte, el intervalo o celda unidimensional se define como:

$$I_i = \left[x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right] \quad (4.74)$$

Notar que en el caso 1D las fronteras de una celda están determinadas solamente por dos puntos. Se denota como f_i^n a la aproximación numérica del valor promedio de f sobre la celda centrada en el punto x_i , esto es:

$$f_i^n = \bar{f}(t^n, x_i, v) = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} f(t^n, x, v) dx \quad (4.75)$$

La conservación de la función de distribución a lo largo de las curvas características de la ecuación unidimensional 4.71, es decir:

$$f(t, x, v) = f[s, X(s; t, x, v), v] \quad (4.76)$$

permite transformar la integral sobre el 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:

$$\begin{aligned} \int_I f(t, x, v) dx &= \int_I f[s, X(s; t, x, v), v] dx \\ &= \int_{X(s; t, I, v)} f(s, x, v) dx \end{aligned} \quad (4.77)$$

Luego, aplicando esta transformación (4.77) al intervalo I_i entre el tiempo t y el tiempo $t + \Delta t$, y usando la notación 4.75, se tiene:

$$\begin{aligned} \int_{I_i} f(t^{n+1}, x, v) dx &= \int_{X(t^n; t^{n+1}, I_i, v)} f(t^n, x, v) dx \\ f_i^{n+1} \Delta x &= \int_{X(t^n; t^{n+1}, x_i - \frac{\Delta x}{2}, v)}^{X(t^n; t^{n+1}, x_i + \frac{\Delta x}{2}, v)} f(t^n, x, v) dx \end{aligned} \quad (4.78)$$

El dominio de integración en la Ec. 4.78 se puede dividir en tres sub intervalos de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} f_i^{n+1} \Delta x &= \int_{X(t^n; t^{n+1}, x_i - \frac{\Delta x}{2}, v)}^{x_i - \frac{\Delta x}{2}} f(t^n, x, v) dx \\ &+ \int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} f(t^n, x, v) dx + \int_{x_i + \frac{\Delta x}{2}}^{X(t^n; t^{n+1}, x_i + \frac{\Delta x}{2}, v)} f(t^n, x, v) dx \end{aligned} \quad (4.79)$$

Lo cual permite reescribir convenientemente esta ecuación como:

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{1}{\Delta x} \left[\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n - \Phi_{i-\frac{1}{2}}^n \right] \quad (4.80)$$

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.

Antes de calcular los flujos, es necesario hallar primero el origen de las características que, en el instante $t + \Delta t$ caen en los límites del intervalo. En los casos con velocidad de advección constante, como en la aproximación electrostática en coordenadas cartesianas, esto se hace explícitamente según las fórmulas (4.52). Una vez conocidos los límites de integración, el cálculo de los flujos se reduce a realizar las integrales definidas en la ecuación (4.79).

El problema ahora, es que no se tiene una función analítica $f(t^n, x, v)$, sino que los valores que se obtienen con el método, son promedios sobre cada celda. Por esta razón, es necesario introducir una representación continua de $f(t^n, x, v)$, válida sobre el intervalo I_i , y que se obtenga a partir de los valores promediados f_j^n . Este paso es lo que se conoce en el marco de los métodos de volúmenes finitos como *reconstrucción*.

4.6.1. 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, 1999a), y se

escribe:

$$f_h(t^n, x, v) = f_i^n + \frac{(x - x_i)}{2\Delta x} [f_{i+1}^n - f_{i-1}^n] \quad (4.81)$$

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

Flujos si $v > 0$:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n = v\Delta t \left[f_i^n + \frac{1}{4} \left(1 - \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) \right] \quad (4.82)$$

Flujos si $v < 0$:

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}^n = v\Delta t \left[f_i^n - \frac{1}{4} \left(1 + \frac{v\Delta t}{\Delta x} \right) (f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) \right] \quad (4.83)$$

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.

4.6.2. Reconstrucción con primitiva cuadrática

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

$$f_i^n \Delta x = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f(t^n, x, v) dx = F(t^n, x_{i+\frac{1}{2}}) - F(t^n, x_{i-\frac{1}{2}}) \quad (4.84)$$

Esto significa que:

$$F(t^n, x_{i+\frac{1}{2}}) = \Delta x \sum_{j=0}^i f_j^n \quad (4.85)$$

$$F(t^n, x_{i-\frac{1}{2}}) = \Delta x \sum_{j=0}^{i-1} f_j^n$$

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

$$\begin{cases} \{x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{3}{2}}\} & \text{si } v > 0 \\ \{x_{i-\frac{3}{2}}, x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\} & \text{si } v < 0 \end{cases} \quad (4.86)$$

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

$$\begin{aligned} f_h(t^n, x, v) &= f_i^n + \frac{(x - x_i)}{\Delta x} (f_{i+1}^n - f_i^n) \quad \text{si } v > 0 \\ f_h(t^n, x, v) &= f_i^n + \frac{(x - x_{i-1})}{\Delta x} (f_i^n - f_{i-1}^n) \quad \text{si } v < 0 \end{aligned} \quad (4.87)$$

Si $v > 0$, se define:

$$\alpha_i = x_{i+\frac{1}{2}} - X(t^n; t^{n+1}, x_{i+\frac{1}{2}}) \quad (4.88)$$

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:

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n = \alpha_i \left[f_i^n + \frac{\epsilon_i^+}{2} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) (f_{i+1}^n - f_i^n) \right] \quad (4.89)$$

Si $v < 0$, se define:

$$\alpha_i = x_{i-\frac{1}{2}} - X(t^n; t^{n+1}, x_{i-\frac{1}{2}}) \quad (4.90)$$

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

$$\Phi_{i-\frac{1}{2}}^n = \alpha_i \left[f_i^n - \frac{\epsilon_i^-}{2} \left(1 + \frac{\alpha_i}{\Delta x} \right) (f_i^n - f_{i-1}^n) \right] \quad (4.91)$$

Notar que se han introducido dos variables en los flujos, ϵ_i^+ y ϵ_i^- . Estos se conocen como limitadores de flujo y, si se eligen adecuadamente, permiten mantener la positividad y monotonicidad del esquema.

4.6.3. Reconstrucción con primitiva cúbica

Si la reconstrucción polinómica de la función primitiva se realiza empleando polinomios cúbicos en la forma de Lagrange, resulta el método PFC (Filbet et al., 2001). La reconstrucción obtenida para la función de distribución es:

$$\begin{aligned} f_h(t^n, x, v) &= f_i^n \\ &+ \frac{\epsilon_i^+}{6\Delta x^2} \left[2(x - x_i) \left(x - x_{i-\frac{3}{2}} \right) + \left(x - x_{i-\frac{1}{2}} \right) \left(x - x_{i+\frac{1}{2}} \right) \right] (f_{i+1}^n - f_i^n) \\ &- \frac{\epsilon_i^-}{6\Delta x^2} \left[2(x - x_i) \left(x - x_{i+\frac{3}{2}} \right) + \left(x - x_{i-\frac{1}{2}} \right) \left(x - x_{i+\frac{1}{2}} \right) \right] (f_i^n - f_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (4.92)$$

Flujos si $v > 0$:

$$\begin{aligned} \Phi_{i+\frac{1}{2}}^n &= \alpha_i f_i^n + \alpha_i \frac{\epsilon_i^+}{6} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) \left(2 - \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) (f_{i+1}^n - f_i^n) \\ &\quad + \alpha_i \frac{\epsilon_i^-}{6} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) \left(1 + \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) (f_i^n - f_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (4.93)$$

Flujos si $v < 0$:

$$\begin{aligned} \Phi_{i-\frac{1}{2}}^n &= \alpha_i f_i^n - \alpha_i \frac{\epsilon_i^+}{6} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) \left(1 + \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) (f_{i+1}^n - f_i^n) \\ &\quad - \alpha_i \frac{\epsilon_i^-}{6} \left(1 + \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) \left(2 + \frac{\alpha_i}{\Delta x}\right) (f_i^n - f_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (4.94)$$

donde las funciones limitadoras de flujo introducidas por Filbet (Filbet et al., 2001) son:

$$\epsilon_i^+ = \begin{cases} \min \left[1; 2 \frac{f_i^n}{f_{i+1}^n - f_i^n} \right] & \text{si } f_{i+1}^n > f_i^n \\ \min \left[1; -2 \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{f_{i+1}^n - f_i^n} \right] & \text{si } f_{i+1}^n < f_i^n \end{cases} \quad (4.95)$$

$$\epsilon_i^- = \begin{cases} \min \left[1; 2 \frac{f_{i-1}^n - f_i^n}{f_i^n - f_{i-1}^n} \right] & \text{si } f_i^n > f_{i-1}^n \\ \min \left[1; -2 \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{f_i^n - f_{i-1}^n} \right] & \text{si } f_i^n < f_{i-1}^n \end{cases} \quad (4.96)$$

El uso de estos limitadores asegura, además de la conservación de los valores integrados de f , que se satisfaga el principio del máximo lo cual implica, a su vez, la conservación de la positividad de la función de distribución.

4.7. Esquemas de volúmenes finitos

Los esquemas semi-Lagrangianos conservativos descritos en la sección anterior se combinan normalmente con la técnica de splitting, ya que esto simplifica el cómputo del origen de las características y permite calcular los flujos usando reconstrucciones unidimensionales de la función de distribución. Sin embargo, este procedimiento puede no ser apropiado para muchos problemas no lineales donde el splitting podría conducir a malas propiedades de conservación o, incluso, a inestabilidades numéricas.

Por este motivo, la familia más nueva de métodos numéricos para la ecuación de Vlasov consiste en esquemas de volúmenes finitos de alto orden sin splitting (Banks y Hittinger, 2010; Colella et al., 2011; Colella y Woodward, 1984; Elkina y Büchner, 2006; Vogman et al., 2018). Estos son conservativos por naturaleza y se pueden implementar de manera tal de preservar monotonicidad y positividad. Además, se pueden extender fácilmente a cualquier número de dimensiones y al orden deseado tanto en el espacio como en el tiempo. Una desventaja que presentan, a diferencia de los semi-Lagrangianos, es que el paso de

tiempo para la integración temporal está restringido por cuestiones de estabilidad.

En el marco de los métodos de volúmenes finitos, se resuelve la forma conservativa o de divergencia de flujos de la ecuación de Vlasov (Ec. 4.70). El dominio numérico, es decir la parte de interés del espacio de fases, se descompone en pequeños volúmenes de control llamados celdas, y la variación temporal de la cantidad de partículas dentro del volumen está dada por los flujos de la función de distribución integrados sobre las fronteras de la celda. La precisión con la cual se calculan los flujos determina la precisión del método.

Dentro de cada celda, la función de distribución obedece la ley de conservación dada por la ecuación de Vlasov bidimensional:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} f(t, x, v) d\Omega + \oint_{\sigma} \mathbf{F}(t, x, v, f) \cdot d\boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (4.97)$$

siendo:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} vf \\ af \end{bmatrix} \quad (4.98)$$

$$d\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} dv \\ dx \end{bmatrix} \quad (4.99)$$

Independientemente de cómo se calculen los flujos, la Ec. 4.97 se puede escribir de forma genérica:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} = rhs(t, f) \quad (4.100)$$

Dada una discretización que permita evaluar los flujos que componen el lado derecho de la Ec. 4.100, la solución puede ser integrada en el tiempo usando los esquemas para ecuaciones diferenciales ordinarias mencionados en la Sección 4.3.

4.7.1. Discretización espacial

En primer lugar se descompone el dominio de interés del espacio de fases en volúmenes de control usando una malla estructurada y uniforme, siendo Δx y Δv , las dimensiones de cada celda en la dirección espacial y de velocidad, respectivamente. Se denota como $\Omega_{i,k}$ a la celda centrada en el punto (x_i, v_k) , es decir:

$$\Omega_{i,k} = \left[x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right] \times \left[v_k - \frac{\Delta v}{2}, v_k + \frac{\Delta v}{2} \right] \quad (4.101)$$

En la Fig. 4.3 se ilustra la discretización del dominio y se indica la nomenclatura usada para denotar las celdas. Sea $f_{i,k}^n$ la aproximación numérica del valor de $f(t, x, v)$ promediado sobre el volumen de la celda $\Omega_{i,k}$, y en el instante de tiempo $t^n = n\Delta t$:

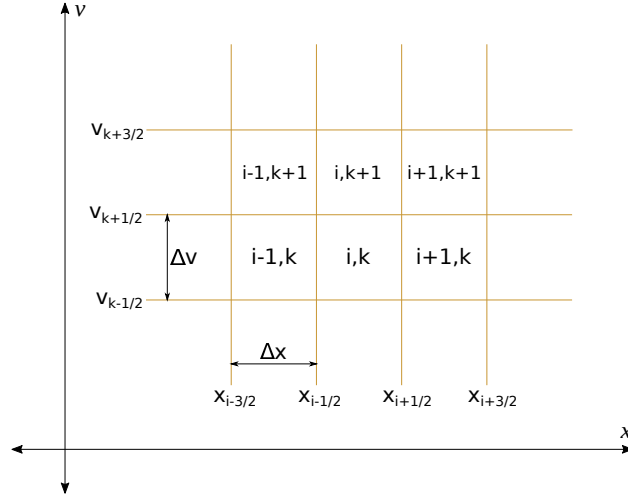


Figura 4.3: Nomenclatura usada para denotar las celdas dentro de la malla estructurada y uniforme.

$$f_{i,k}^n = \frac{1}{\Delta x \Delta v} \int_{\Omega_{i,k}} f(t^n, x, v) dx dv \quad (4.102)$$

Integrando la ecuación 4.97 sobre la celda $\Omega_{i,k}$ y dividiendo por su volumen $\Delta x \Delta v$, se obtiene:

$$\frac{d}{dt} f_{i,k}^n = -\frac{1}{\Delta x} \left(\langle F_x \rangle_{i+\frac{1}{2},k} - \langle F_x \rangle_{i-\frac{1}{2},k} \right) - \frac{1}{\Delta v} \left(\langle F_v \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} - \langle F_v \rangle_{i,k-\frac{1}{2}} \right) \quad (4.103)$$

donde los corchetes $\langle F \rangle$ denotan cantidades promediadas sobre las superficies rectangulares y ortogonales que forman las caras de la celda (ver Fig. 4.4). Estas son:

$$\langle F_x \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{1}{\Delta v} \int_{v_k - \frac{\Delta v}{2}}^{v_k + \frac{\Delta v}{2}} v f \left(t^n, x_{i+\frac{1}{2}}, v \right) dv \quad (4.104)$$

$$\langle F_v \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i - \frac{\Delta x}{2}}^{x_i + \frac{\Delta x}{2}} a(t^n, x) f \left(t^n, x, v_{k+\frac{1}{2}} \right) dx \quad (4.105)$$

Las expresiones para las otras dos caras son completamente análogas a las anteriores.

La componente del flujo en cada dirección, en cualquier sistema de coordenadas, es el producto de la función de distribución por la velocidad de advección en esa dirección. Entonces, para computar los flujos promediados sobre las caras de las celdas es necesario, por un lado, aproximar el promedio del producto entre dos cantidades, y por otro lado, aproximar valores promediados sobre las caras a partir de valores promediados sobre las celdas. Lo primero se lleva a cabo usando las relaciones entre valores puntuales e integrales de superficie derivadas a partir de la expansión en series de Taylor de las cantidades en cuestión, mientras que para lo segundo, se hace una interpolación polinómica de las integrales de volumen.

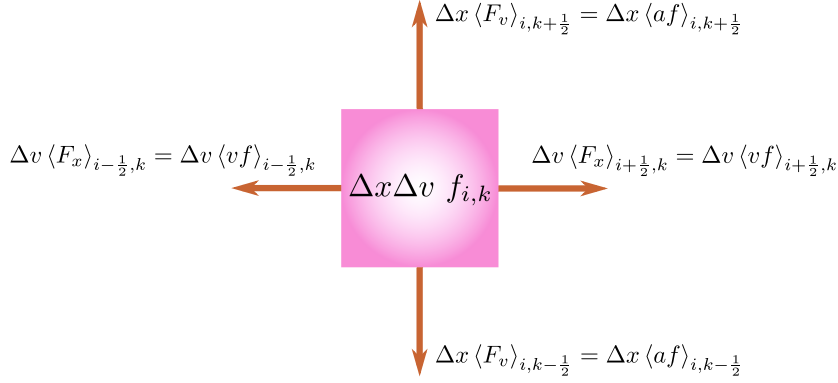


Figura 4.4: Celda genérica y sus flujos asociados.

4.7.2. Aproximación de la integral del producto entre dos cantidades

Supongamos que el flujo F_x sobre la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k}$ normal a la dirección de x en $x = x_{i+\frac{1}{2}}$ se compone del producto entre dos cantidades f y g . Sean $f_{i+\frac{1}{2},k}$ y $g_{i+\frac{1}{2},k}$ los valores puntuales de f y g en el centro de la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k}$, respectivamente. Expandiendo las funciones f y g en series de Taylor alrededor de dicho centro e integrando sobre la cara, se obtienen las siguientes relaciones:

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \int_{\sigma_{i+\frac{1}{2},k}} f dv = f_{i+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{24} \Delta v^2 \frac{\partial^2 f}{\partial v^2} + \mathcal{O}(\Delta v^4) \quad (4.106)$$

$$\langle g \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \int_{\sigma_{i+\frac{1}{2},k}} g dv = g_{i+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{24} \Delta v^2 \frac{\partial^2 g}{\partial v^2} + \mathcal{O}(\Delta v^4) \quad (4.107)$$

$$\langle fg \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \int_{\sigma_{i+\frac{1}{2},k}} fg dv = f_{i+\frac{1}{2},k} g_{i+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{24} \Delta v^2 \frac{\partial^2 (fg)}{\partial v^2} + \mathcal{O}(\Delta v^4) \quad (4.108)$$

Las ecuaciones 4.106 y 4.107 dan las relaciones entre los valores promediados sobre la cara y los valores puntuales en el centro de la cara para una cantidad simple, mientras que la Ec. 4.108 provee esta relación para el producto de dos funciones. Usando las tres ecuaciones anteriores, se puede expresar $\langle fg \rangle_{i+\frac{1}{2},k}$ sólo en función de las cantidades promediadas sobre la cara y de las derivadas transversales de la siguiente manera:

$$\langle fg \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} \langle g \rangle_{i+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{12} \Delta v^2 \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial g}{\partial v} + \mathcal{O}(\Delta v^4) \quad (4.109)$$

Las expresiones 4.108 y 4.109 permiten aproximar con una precisión de cuarto orden los flujos en la dirección de x a partir de valores promediados sobre las caras de la celda (Colella et al., 2009, 2011; McCorquodale et al., 2015). En el caso de la Ec. 4.108 los valores puntuales en el centro de la cara se calculan con las Ecs. 4.106 y 4.107. Si se eliminan los términos que contienen las derivadas transversales, la aproximación que se

obtiene es de segundo orden.

Si bien la aproximación de cuarto orden requiere información sobre la variación transversal de las variables a lo largo de la cara, es suficiente con aproximar las derivadas mediante fórmulas de diferencias finitas centradas de segundo orden (Banks y Hittinger, 2010; Vogman et al., 2018). Lo único que resta para poder calcular los flujos es determinar los valores promediados sobre las caras a partir de los valores promediados sobre las celdas, lo cual se realiza por medio de una reconstrucción polinómica unidimensional.

4.7.3. Interpolación polinómica unidimensional

Para obtener los valores promediados sobre la superficie de las caras $\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k}$ a partir de los valores promediados sobre el volumen de las celdas $f_{i,k}^n$ se usa una reconstrucción polinómica P_d de grado d de la solución de la forma:

$$P_d(x) = p_d x^d + \dots + p_2 x^2 + p_1 x + p_0 \quad (4.110)$$

Determinar los $d + 1$ coeficientes p_i requiere evaluar $d + 1$ condiciones de interpolación obtenidas usando $d + 1$ valores promediados sobre las celdas cercanas a la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k}$. Por ejemplo, si la reconstrucción se realiza con un polinomio de tercer grado y se usa el stencil centrado dado por las celdas:

$$\{i - 1, i, i + 1, i + 2\} \quad (4.111)$$

Luego, las 4 condiciones de interpolación son:

$$\begin{aligned} f_{i-1,k} &= \int_{x_{i-\frac{3}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{2}}} P_3(x) dx \\ f_{i,k} &= \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} P_3(x) dx \\ f_{i+1,k} &= \int_{x_{i+\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{3}{2}}} P_3(x) dx \\ f_{i+2,k} &= \int_{x_{i+\frac{3}{2}}}^{x_{i+\frac{5}{2}}} P_3(x) dx \end{aligned} \quad (4.112)$$

Al realizar las integrales definidas en las ecuaciones 4.112 se consigue un sistema de 4 ecuaciones lineales cuyas incógnitas son los coeficientes del polinomio interpolante. Resolviendo este sistema y evaluando el polinomio en $x = x_{i+\frac{1}{2}}$ se obtiene la aproximación buscada:

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{7}{12} (f_{i,k} + f_{i+1,k}) - \frac{1}{12} (f_{i-1,k} + f_{i+2,k}) \quad (4.113)$$

Llamaremos CD4 a la reconstrucción centrada de 4 celdas dada por la Ec. 4.113. De la misma forma, la reconstrucción centrada con 6 celdas se llama CD6, y las reconstrucciones laterales con 3 y 5 celdas se llaman UP3 y UP5, respectivamente. Las aproximaciones de la función de distribución promediada sobre la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k}$ obtenidas empleando las reconstrucciones mencionadas son (Crouseilles et al., 2012):

CD6 :

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{37}{60} (f_{i,k} + f_{i+1,k}) - \frac{8}{60} (f_{i-1,k} + f_{i+2,k}) + \frac{1}{60} (f_{i-2,k} + f_{i+3,k}) \quad (4.114)$$

UP3 ($v_k > 0$) :

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{1}{6} (-f_{i-1,k} + 5f_{i,k} + 2f_{i+1,k}) \quad (4.115)$$

UP3 ($v_k < 0$) :

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{1}{6} (2f_{i,k} + 5f_{i+1,k} - f_{i+2,k}) \quad (4.116)$$

UP5 ($v_k > 0$) :

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{1}{60} (2f_{i-2,k} - 13f_{i-1,k} + 47f_{i,k} + 27f_{i+1,k} - 3f_{i+2,k}) \quad (4.117)$$

UP5 ($v_k < 0$) :

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{1}{60} (-3f_{i-1,k} + 27f_{i,k} + 47f_{i+1,k} - 13f_{i+2,k} + 2f_{i+3,k}) \quad (4.118)$$

Notar que el stencil requerido para una reconstrucción lateral de tipo upwind depende de la dirección en la que se propaga la información, es decir, del signo de la velocidad de advección. Las expresiones para la reconstrucción polinómica en la dirección de v son análogas a las Ecs. 4.113 - 4.118, sólo que la velocidad de advección en esa dirección es a_i .

Con el objetivo de controlar las oscilaciones y preservar la suavidad de la solución, puede ser conveniente no emplear un stencil fijo para la reconstrucción sino elegir el stencil en función de las características locales de la función de distribución, o bien sino, usar simultáneamente varias reconstrucciones con distintas ponderaciones. En este caso, el método es comúnmente llamado de tipo ENO o WENO (Shu, 1998, 2003). El esquema de Banks (Banks y Hittinger, 2010) se diferencia de un esquema WENO tradicional en que los pesos no están asociados, en principio, con ningún stencil particular lo cual le permite optimizar los radios de convergencia en ciertas zonas del dominio.

4.7.4. Cálculo de los flujos

Una vez aproximados los valores de las variables primarias promediados sobre las caras en función de los valores promediados sobre el volumen de las celdas, es posible calcular

los flujos por medio de las expresiones 4.108 o 4.109. Las cantidades buscadas son:

$$\langle F_x \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = \langle vf \rangle_{i+\frac{1}{2},k} \quad (4.119)$$

$$\langle F_v \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} = \langle af \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} \quad (4.120)$$

Usando la Ec. 4.109, el flujo en la dirección de x sobre la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k}$ puede escribirse como:

$$\begin{aligned} \langle vf \rangle_{i+\frac{1}{2},k} &= \langle v \rangle_{i+\frac{1}{2},k} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{12} \Delta v^2 \left[\frac{\partial v}{\partial v} \frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i+\frac{1}{2},k} \\ &= v_k \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{12} \Delta v^2 \left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i+\frac{1}{2},k} \end{aligned} \quad (4.121)$$

donde la derivada transversal a la cara respecto de v se aproxima mediante diferencias finitas centradas de segundo orden usando los valores promediados sobre las caras adyacentes:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial v} \right]_{i+\frac{1}{2},k} = \frac{1}{2\Delta v} \left(\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k+1} - \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k-1} \right) \quad (4.122)$$

Sustituyendo la Ec. 4.122 en la Ec. 4.121 resulta la expresión buscada para el flujo en la dirección de x :

$$\langle F_x \rangle_{i+\frac{1}{2},k} = v_k \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k} + \frac{1}{24} \Delta v \left(\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k+1} - \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k-1} \right) \quad (4.123)$$

De la misma manera, el flujo en la dirección de v sobre la cara $\sigma_{i,k+\frac{1}{2}}$ puede escribirse:

$$\begin{aligned} \langle af \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} &= \langle a \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{12} \Delta x^2 \left[\frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k+\frac{1}{2}} \\ &= a_i \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{12} \Delta x^2 \left[\frac{\partial a}{\partial x} \right]_i \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.124)$$

donde las derivadas transversales respecto de x se aproximan por:

$$\left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,k+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\Delta x} \left(\langle f \rangle_{i+1,k+\frac{1}{2}} - \langle f \rangle_{i-1,k+\frac{1}{2}} \right) \quad (4.125)$$

$$\left[\frac{\partial a}{\partial x} \right]_i = \frac{1}{2\Delta x} (a_{i+1} - a_{i-1}) \quad (4.126)$$

Finalmente, reemplazando las Ecs. 4.125 y 4.126 en la Ec. 4.124, se obtiene la expresión buscada para el flujo en la dirección de v :

$$\langle F_v \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} = a_i \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{48} \left(\langle f \rangle_{i+1,k+\frac{1}{2}} - \langle f \rangle_{i-1,k+\frac{1}{2}} \right) (a_{i+1} - a_{i-1}) \quad (4.127)$$

Si, en lugar de usar la Ec. 4.109 para expresar el flujo, se usa la Ec. 4.108, entonces la expresión que se obtiene es equivalente pero no idéntica:

$$\langle F_v \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} = a_i \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{24} \left[\langle f \rangle_{i+1,k+\frac{1}{2}} (a_{i+1} - a_i) - \langle f \rangle_{i-1,k+\frac{1}{2}} (a_i - a_{i-1}) \right] \quad (4.128)$$

Capítulo 5

Pruebas numéricas en coordenadas cartesianas

Con el objetivo de evaluar y comparar los distintos métodos descritos en el capítulo anterior, se llevarán a cabo una serie de simulaciones de problemas clásicos que se usan cotidianamente como benchmarks de los métodos numéricos para el sistema Vlasov-Poisson en dos dimensiones del espacio de fases. Estos problemas de prueba son: el amortiguamiento débil o lineal de Landau, el amortiguamiento fuerte o no lineal de Landau, la inestabilidad de las dos corrientes (*two-stream instability*), y la inestabilidad *bump-on-tail*.

5.1. 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 predicha 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} . Como consecuencia de esta interacción, parte de la energía potencial eléctrica del plasma es transformada en energía cinética o, lo que es equivalente, en energía térmica (Chen, 2016; Nicholson, 1992).

Este problema particular se usa ampliamente como benchmark para evaluar las características de los métodos numéricos para el sistema Vlasov-Poisson. Esto se debe a que en el caso de un plasma no relativista y no magnetizado, compuesto por electrones y un fondo fijo de iones distribuidos uniformemente en el espacio, la teoría de perturbaciones permite calcular analíticamente la evolución temporal de la onda causada por una pequeña perturbación inicial. Lo que se obtiene, es que dicha onda evoluciona proporcionalmente a

$e^{i(kx-\omega t)}$, donde la parte imaginaria de ω representa la tasa de amortiguamiento.

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

$$\gamma = \Im(\omega) = -\sqrt{\pi} \frac{\omega_{pe}^3}{k^2} \frac{v_{ph}}{2\sqrt{2}v_{th}^3} \exp\left(-\frac{v_{ph}^2}{2v_{th}^2}\right) \quad (5.1)$$

donde la velocidad de fase aproximada es:

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{k} \sqrt{\omega_{pe}^2 + \frac{3}{2}k^2 v_{th}^2} \quad (5.2)$$

Es usual aproximar v_{ph} por ω_{pe}/k en el coeficiente de la ecuación (5.1), pero no en el exponente, para así obtener una expresión más sencilla para el amortiguamiento (ver (Gurnett y Bhattacharjee, 2017)):

$$\gamma = -\sqrt{\pi} \frac{\omega_{pe}}{2\sqrt{2}k^3 \lambda_{De}^3} \exp\left(-\frac{1}{2k^2 \lambda_{De}^2} - \frac{3}{2}\right) \quad (5.3)$$

En las expresiones anteriores, λ_{De} es la longitud de Debye electrónica, ω_{pe} es la frecuencia de plasma electrónica, y v_{th} es la velocidad térmica unidimensional de los electrones. Estos parámetros se encuentran definidos en la Sección 2.1.1.

Para la simulación numérica, se considera un plasma completamente ionizado compuesto por iones positivos de hidrógeno, o sea protones, y electrones, que se extiende indefinidamente sobre un espacio de fases bidimensional, con una dimensión física y una de velocidad. Aprovechando la disparidad entre las masas de los protones y de los electrones, se asume que los primeros se encuentran en equilibrio termodinámico, distribuidos uniformemente en el espacio, y estacionarios. Por su parte, los electrones se asumen inicialmente con una distribución de equilibrio pero no uniforme, sino que perturbada en el espacio, y pueden desplazarse libremente sujetos a las fuerzas de interacción.

Esto significa que la dinámica del plasma se puede modelar mediante una única función de distribución bidimensional para los electrones y un campo electrostático unidimensional. La densidad de carga de los electrones, en cada punto del dominio físico, se obtiene por integración de esta función en el espacio de velocidades, mientras que la densidad de los iones es uniforme y constante en el tiempo.

Cuando la perturbación inicial es lo suficientemente pequeña, el amortiguamiento de las ondas electrostáticas continúa indefinidamente en el tiempo hasta que toda la energía del campo eléctrico es transferida a los electrones, en cuyo caso se denomina amortiguamiento débil o lineal. Por el contrario, cuando la perturbación es relativamente grande, se observa el llamado amortiguamiento fuerte o no lineal.

Las propiedades del estado inicial del plasma consisten en una distribución de Maxwell-

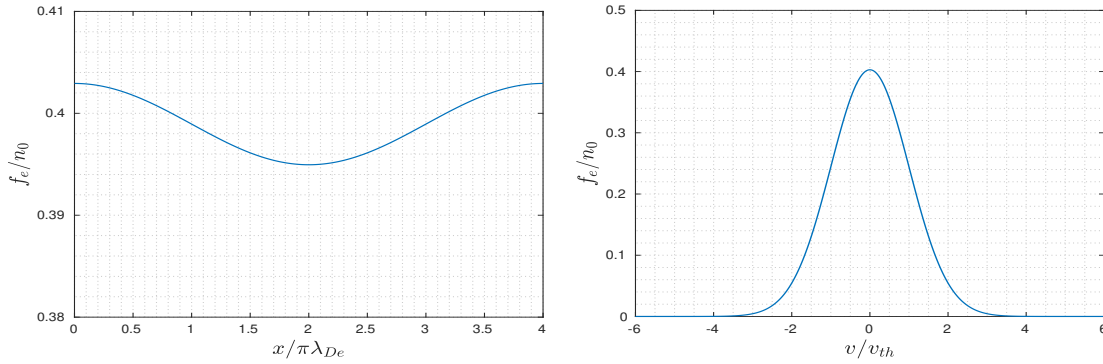


Figura 5.1: Condición inicial para la función de distribución para el amortiguamiento lineal de Landau. Izquierda: perturbación en el espacio físico. Derecha: distribución de Maxwell-Boltzmann en el espacio de velocidades.

Boltzmann para los iones $f_0(v)$, y una distribución perturbada en el espacio físico para los electrones $f_e(0, x, v)$ como la que se observa en la Fig. 5.1. Esta condición inicial está dada por la expresión siguiente:

$$f_e(0, x, v) = f_0(v) (1 + \alpha \cos(kx)) \quad (5.4)$$

Siendo:

$$\begin{aligned} f_0(v) &= n_0 \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k_B T_e}} \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2k_B T_e}\right) \\ &= n_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi} v_{th}} \exp\left(-\frac{v^2}{2v_{th}^2}\right) \end{aligned} \quad (5.5)$$

La amplitud de la perturbación es $\alpha = 0,01$, y la constante de la onda o *wavenumber* es $k = 0,5 / \lambda_{De}$. Los parámetros característicos del estado inicial del plasma son: temperatura de los electrones $T_e = 10^5 \text{ K}$, y densidad de electrones $n_0 = 10^{10} \text{ m}^{-3}$.

Es muy común normalizar todas las variables en términos de cantidades características y resolver las ecuaciones de manera adimensional, pero como los resultados son cualitativamente los mismos, aquí optamos por operar con las variables dimensionales. Los parámetros secundarios del plasma sin perturbar son:

Longitud de Debye electrónica:	$\lambda_{De} = 2,182E - 01 \text{ m}$
Frecuencia de plasma electrónica:	$\omega_{pe} = 5,642E + 06 \text{ 1/s}$
Velocidad térmica electrónica:	$v_{the} = 1,231E + 06 \text{ m/s}$

Cuadro 5.1: Parámetros característicos del plasma sin perturbar.

Dado que es imposible modelar y simular un espacio de extensión infinita, el dominio numérico está limitado por $x \in [0, L]$ en el espacio físico, y por $v \in [-v_{max}, v_{max}]$ en el

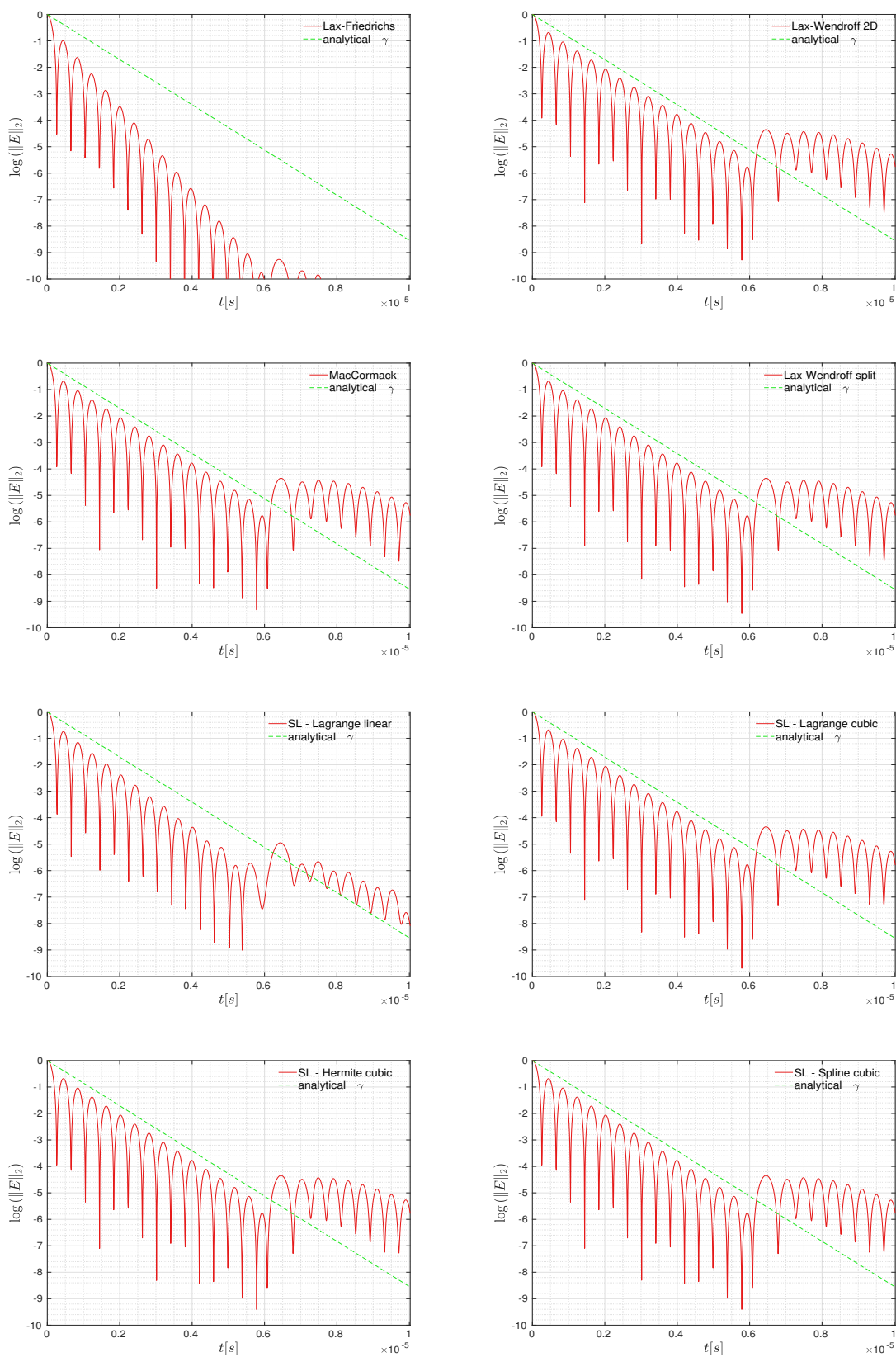


Figura 5.2: Evolución temporal de la norma L_2 del campo eléctrico en el amortiguamiento lineal de Landau. Comparación entre los distintos métodos numéricos (línea continua) y la predicción analítica (línea de trazos).

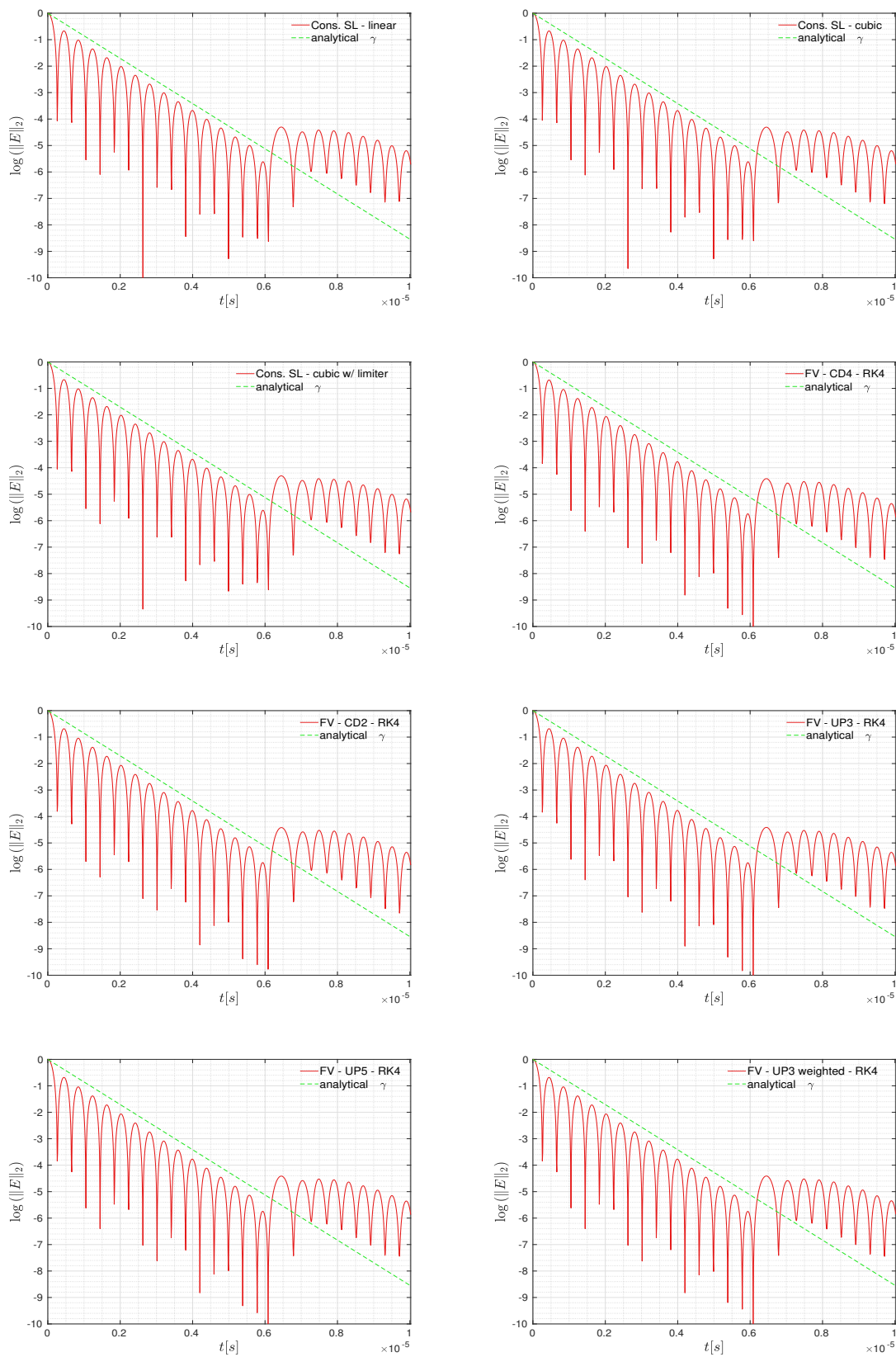


Figura 5.2: Continuación.

espacio de velocidades. Donde los límites son: $L = 4\pi \lambda_{De}$ y $v_{max} = 8 v_{th}$. Las condiciones de contorno para la función de distribución de electrones se eligen de manera tal de simular un dominio espacial periódico con período $2\pi/k$, y un espacio de velocidades infinito. Estas condiciones, periódicas y de Dirichlet, son:

$$f(t, 0, v) = f(t, L, v) \quad (5.6)$$

$$f(t, x, -v_{max}) = f(t, x, v_{max}) = 0 \quad (5.7)$$

Notar que para que la segunda condición de borde (5.7) sea físicamente consistente, 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 empleada para las simulaciones de este problema está dada por la cantidad de nodos en la dirección de x : $N_x = 100$, y en la dirección de v : $N_v = 200$. Por otro lado, el paso de tiempo elegido es: $\Delta t = 0,9 \Delta x / v_{max} = 2,506E-09 \text{ s} = 1,414E-02 / \omega_{pe}$. 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. El tiempo total simulado es de 4000 pasos de tiempo, equivalentes a $t = 56,55 / \omega_{pe}$.

En la Figura 5.2 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. La línea de puntos representa a la predicción teórica de la tasa de decremento en la amplitud de las oscilaciones calculada según la ecuación 5.3. Se puede apreciar a partir de la figura, que el amortiguamiento obtenido con casi todos los métodos numéricos mostrados está en muy buena concordancia con el predicho por la teoría lineal. Los esquemas de Lax-Friedrichs y semi-Lagrangiano con interpolación lineal solamente se incluyen como ejemplos de esquemas que son demasiado disipativos como para proporcionar resultados valiosos.

Algo que llama la atención, es que el amortiguamiento del campo no se prolonga indefinidamente, sino que luego de un tiempo, la energía eléctrica vuelve a aumentar. Este fenómeno se conoce como reaparición (*recurrence*) y no es físico sino numérico, y se debe a la resolución finita en el espacio de velocidades. Si el campo eléctrico es ignorado, entonces la solución de la ecuación de Vlasov es simplemente el transporte libre en x dado por un conjunto de características, cada una con velocidad v . Luego de un tiempo, llamado tiempo de reaparición T_R , cada característica volverá a su posición inicial y el campo eléctrico, ya amortiguado, exhibirá una reaparición parcial. El tiempo de reaparición teórico es:

$$T_R = \frac{2\pi}{k\Delta v} \quad (5.8)$$

Cuando el campo eléctrico inicial no es pequeño o cuando ocurre alguna inestabilidad, el

fenómeno de recurrencia pasa generalmente inadvertido. Esto es importante a la hora de juzgar la precisión de los distintos métodos para aproximar la tasa de amortiguamiento y para conservar los invariantes del sistema Vlasov-Poisson, ya que debe prestarse atención solamente a los resultados previos a la reaparición.

En las Figuras 5.3 y 5.4 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 SL conservativos y los basados en volúmenes finitos presenten las mejores características en este aspecto. Sorprendentemente, los esquemas basados en diferencias finitas también conservan la norma L_1 de f con la precisión de la computadora. Con los esquemas semi-Lagrangianos advectivos, por su parte, se observa un aumento de $\|f\|_1$ aunque muy pequeño.

La conservación de la norma $\|f\|_2$ es representativa de la disipación numérica de los esquemas. Se puede apreciar que su variación es muy pequeña en los esquemas de diferencias finitas y en los advectivos, mientras que es un poco mayor en los conservativos y de volúmenes finitos. El esquema FV con reconstrucción CD4 es el que peor conserva $\|f\|_2$, presentando una disminución relativa de $1E-3\%$ al final de la simulación. La baja disipación de los esquemas no conservativos parece ser una característica positiva, sin embargo, esto puede causar inestabilidades para tiempos largos, especialmente en problemas no lineales.

La Figura 5.5 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. El máximo aumento relativo registrado es $2E-4\%$ dado por el esquema FV con reconstrucción UP3. Los esquemas de diferencias finitas exhiben aquí un comportamiento diferente, disminuyendo la entropía inicialmente para luego empezar a aumentar. Si bien esto parece extraño, tanto la disminución inicial como el crecimiento posterior, son relativamente muy pequeños.

Por su parte, la variación en el tiempo de la energía total ε_{total} es graficada en la Figura 5.6. En general, puede apreciarse que con la resolución usada para las grillas, todos los esquemas presentan resultados similares y muy consistentes. Se observan pequeñas oscilaciones y un incremento de la energía durante la parte inicial de la simulación, para luego mantenerse aproximadamente constante hasta que ocurre la recurrencia. Estos incrementos son máximos con los esquemas semi-Lagrangianos conservativos, donde la energía total crece $5E-4\%$ del valor inicial, y mínimos con los SL advectivos.

Notar que los valores graficados en las Figuras 5.2 - 5.6 no son valores absolutos, sino las variaciones normalizadas respecto de la condición inicial. Esto quiere decir que valores positivos representan un aumento de la cantidad en cuestión mientras que valores negativos implican una disminución. Los resultados mostrados hasta el momento sugieren que todos los esquemas presentan notables características para simular este problema

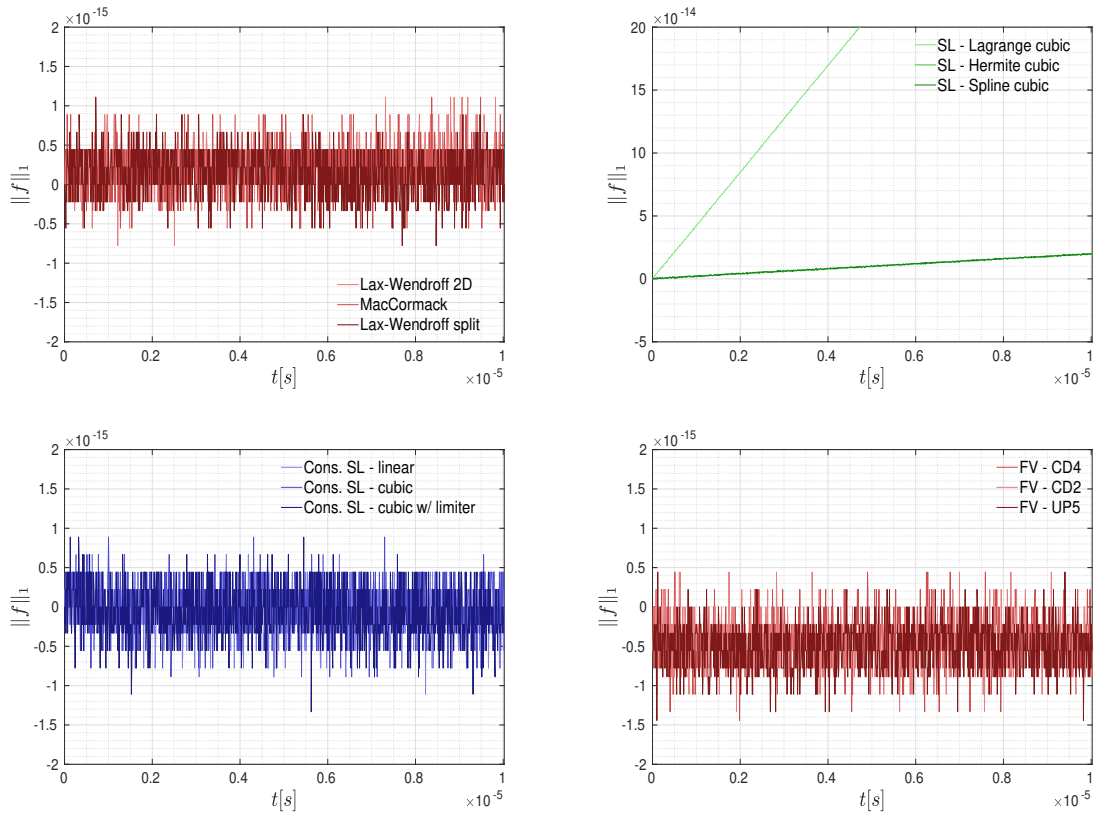


Figura 5.3: Evolución de la norma L_1 de f en el amortiguamiento lineal de Landau.

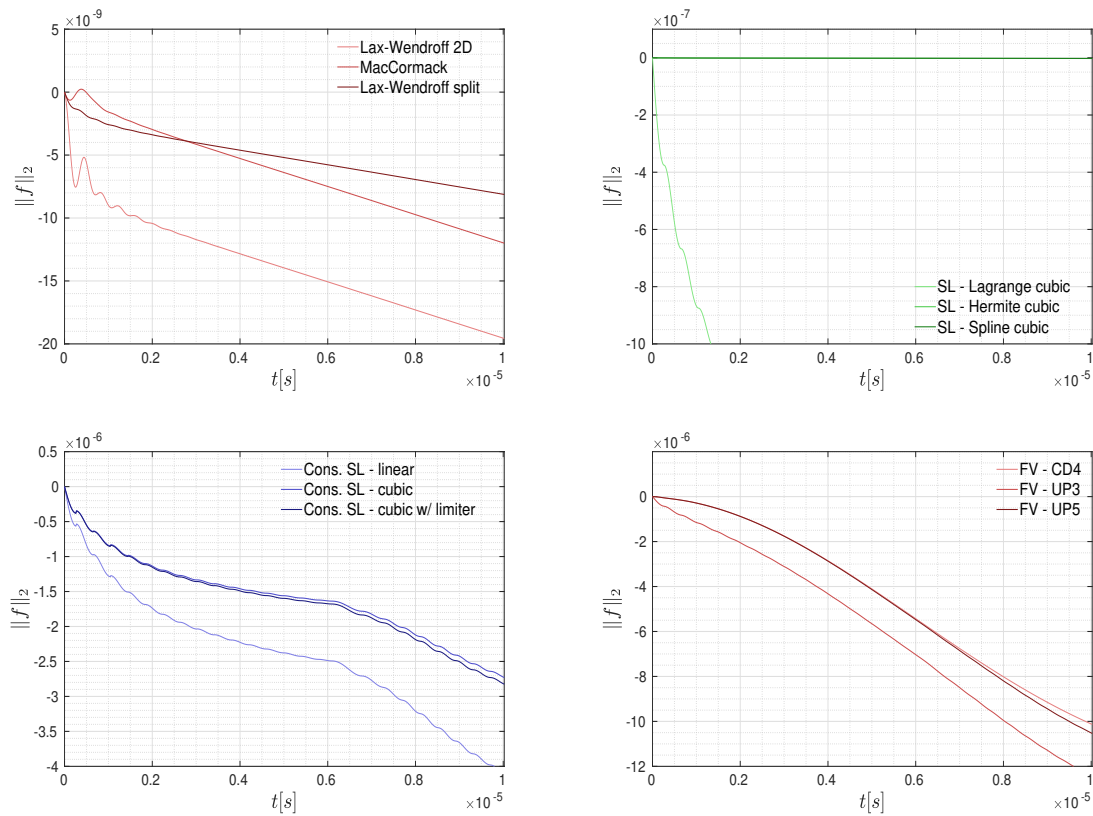


Figura 5.4: Evolución de la norma L_2 de f en el amortiguamiento lineal de Landau.

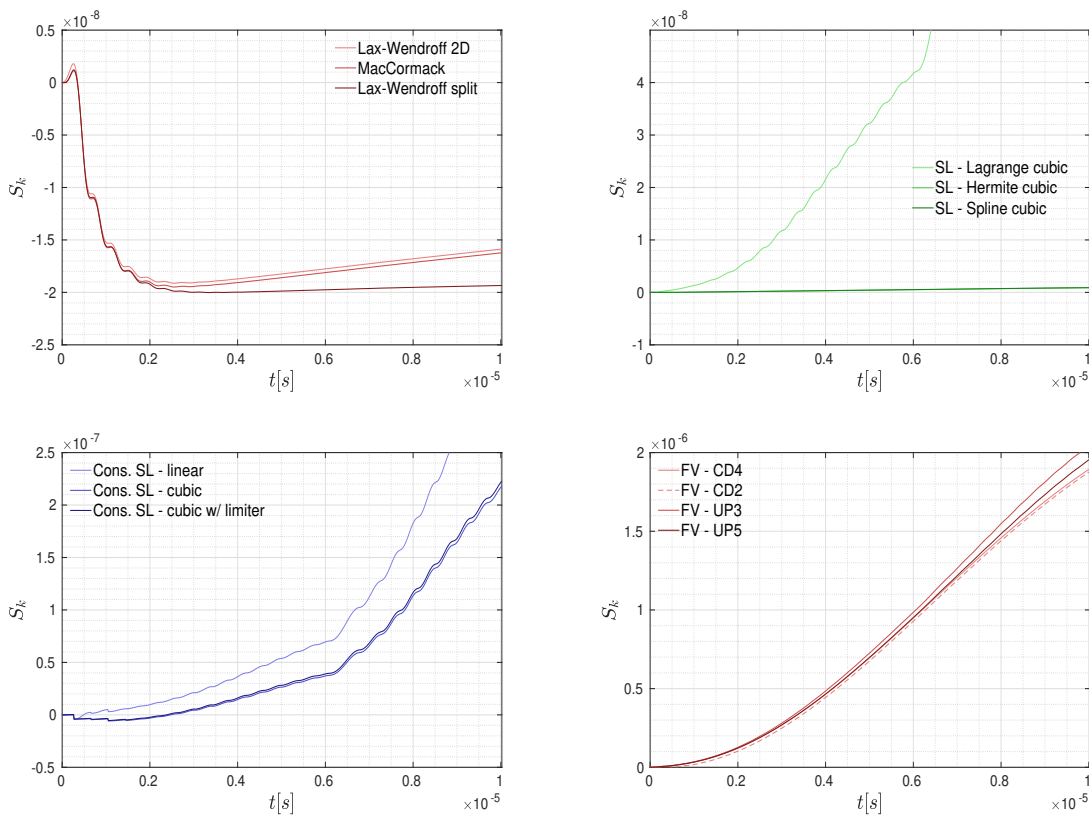


Figura 5.5: Evolución de la entropía cinética S_k en el amortiguamiento lineal de Landau.

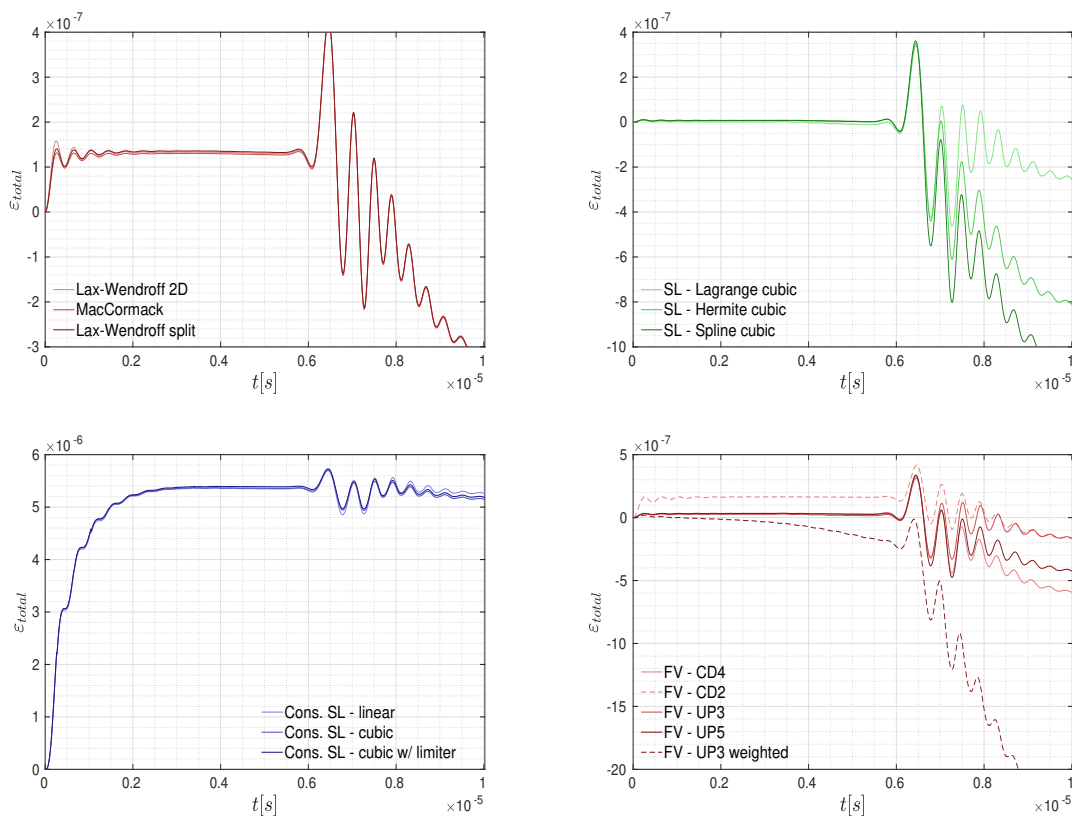


Figura 5.6: Evolución de la energía total ϵ_{total} en el amortiguamiento lineal de Landau.

particular.

5.2. Amortiguamiento no lineal de Landau

Cuando la amplitud de la perturbación es relativamente grande, el comportamiento observado es cualitativamente diferente al del caso anterior. El campo electrostático decae inicialmente hasta que los efectos no lineales producen un aumento posterior, aunque sin recuperar la amplitud original. El amortiguamiento no lineal de Landau es uno de los pocos problemas de cinética de plasmas no lineales para los cuales existe una solución aproximada semi analítica.

El dominio numérico, la malla, las condiciones iniciales y las condiciones de borde empleadas para simular este caso son los mismos que para el amortiguamiento lineal, con la diferencia de que la amplitud de la perturbación en la Ec. 5.4 es ahora $\alpha = 0,5$. La resolución de la grilla usada para este caso es $N_x = 200$ en la dirección de x , y $N_v = 400$ en la dirección de v . El paso de tiempo es $\Delta t = 7,069E-03 / \omega_{pe}$, y el tiempo simulado es, al igual que en el caso lineal, $t = 56,55 / \omega_{pe}$.

En la Figura 5.7 se grafica la evolución temporal del logaritmo de la norma L_2 del campo eléctrico obtenida con los distintos esquemas para el caso del amortiguamiento fuerte o no lineal de Landau. Las líneas de trazos representan las tasas, de amortiguamiento inicial y de crecimiento posterior, calculadas de forma aproximada según la teoría lineal. Nuevamente, se incluyen los resultados obtenidos con los métodos de Lax-Friedrichs y SL advectivo con interpolación lineal para mostrar como la disipación excesiva impide capturar numéricamente el fenómeno físico. En cuanto al resto de los esquemas, puede observarse una muy buena correlación entre el comportamiento del campo eléctrico simulado y el predicho por la teoría.

Con el propósito de dar una idea de cómo se desarrolla la filamentación del espacio de velocidades, se ilustra en la Figura 5.8 la diferencia entre la función de distribución de velocidades y la distribución inicial, para distintos instantes de tiempo, en un punto fijo del espacio $x = 0$. En la medida que los filamentos se hacen más pequeños que la malla, estos son disipados por la mayoría de los esquemas, teniendo un efecto estabilizante y, a su vez, produciendo un aumento de entropía como el visto en la Figura 5.5.

En el primer instante de tiempo graficado (izquierda), no se ven diferencias entre los distintos esquemas pero en $t = 22,6 / \omega_{pe}$ (medio), las discrepancias empiezan a notarse siendo evidentes al final de la simulación (derecha). Se observa que los esquemas semi-Lagrangianos con interpolación polinómica en forma de Lagrange son más disipativos que los que usan interpolación de Hermite, no obstante, los SL conservativos son los que más disipan las pequeñas estructuras en el espacio de velocidades. Por su parte, la disipación de los métodos de volúmenes finitos depende de la reconstrucción usada, siendo

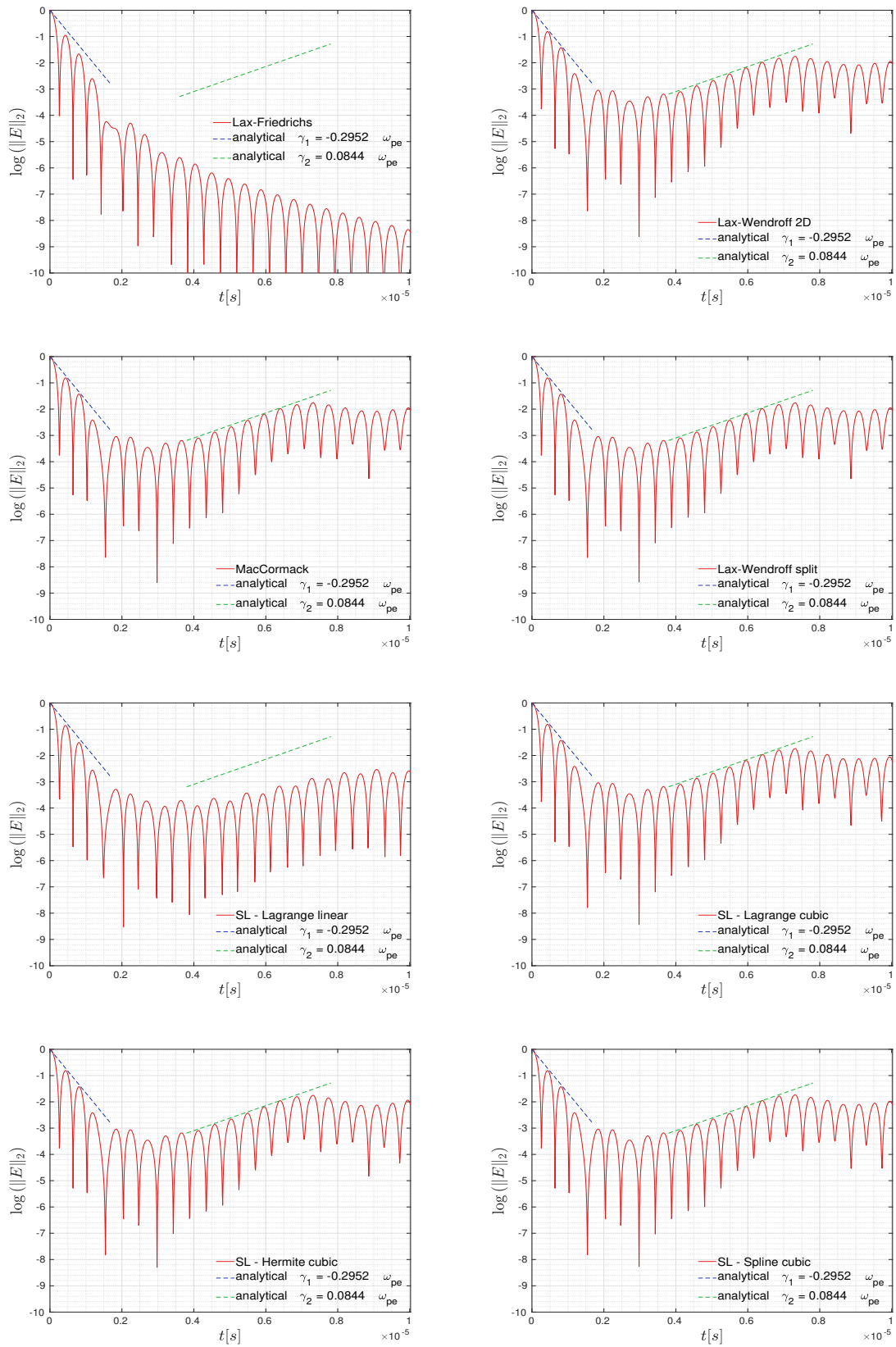


Figura 5.7: Evolución temporal de la norma L_2 del campo eléctrico en el amortiguamiento no lineal de Landau. Comparación entre los distintos métodos numéricos (línea continua) y la predicción analítica (línea de trazos).

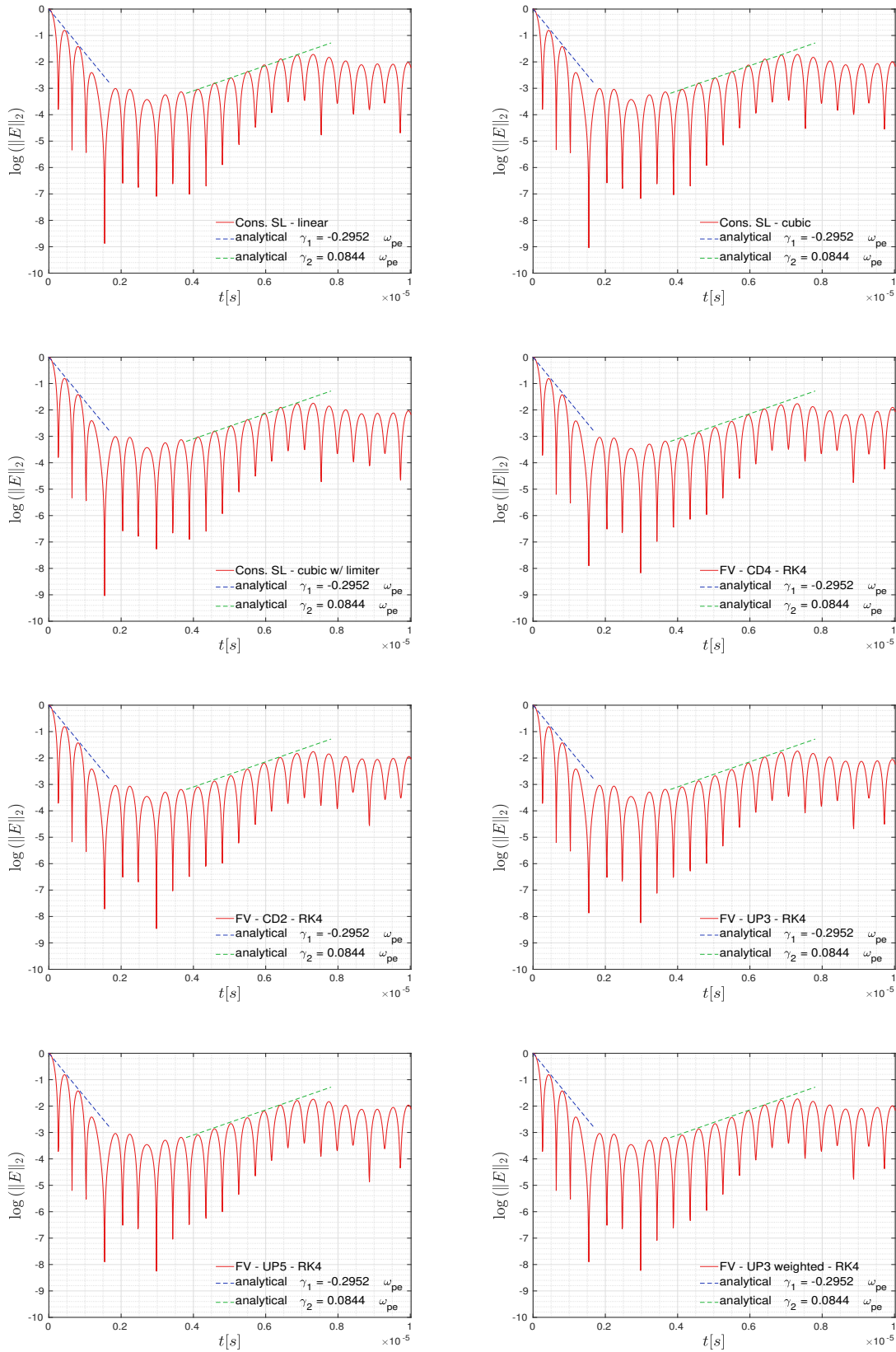


Figura 5.7: Continuación.

las reconstrucciones de tipo *upwind* más disipativas que las centradas.

5.3. Inestabilidad de dos corrientes

La inestabilidad de las dos corrientes, más conocida por su nombre en inglés (*two-stream instability*), es otra familia de problemas ampliamente usados como benchmarks para evaluar métodos numéricos para el sistema Vlasov-Poisson en dos dimensiones del espacio de fases (x, v) . Se trata de una inestabilidad del espacio de velocidades, la cual puede ser estudiada tanto con las ecuaciones fluidas como con la teoría cinética (Krall y Trivelpiece, 1973; Nicholson, 1992; Swanson, 2003). Esta se puede inducir mediante un haz de partículas de la misma especie, que se mueve a través de un plasma neutralizante con velocidad uniforme, en cuyo caso la energía del haz puede conducir a la excitación de ondas en el plasma.

Existen muchos tipos de inestabilidades de dos corrientes, siendo los casos más estudiados la inestabilidad haz-plasma, la inestabilidad bump-on-tail, y las inestabilidades de dos haces. En este último caso, se tienen dos corrientes de la misma especie con igual densidad de partículas, que se desplazan a través del fondo neutralizante con velocidades opuestas. Al introducir una perturbación espacial en la densidad de los haces, estos comienzan a interactuar y mezclarse en el espacio de fases, resultando en una amplificación del campo electrostático. Es usual estudiar dos situaciones límites, una con dos haces fríos en los cuales hay pocas partículas resonantes con la onda, y otra, con dos haces calientes donde existen partículas resonantes de uno o de ambos haces.

Se consideran tres condiciones iniciales diferentes que dan lugar a la inestabilidad:

Condición A

La condición inicial para la función de distribución de electrones es:

$$f_e(0, x, v) = f_0(v) \frac{v^2}{v_{th}^2} (1 + \alpha \cos(kx)) \quad (5.9)$$

siendo $f_0(v)$ la distribución de Maxwell-Boltzmann dada por la Ec. 5.5. Esta condición inicial se ilustra en la Fig. 5.9.

Los parámetros característicos del estado inicial son los mismos que los usados para el amortiguamiento lineal, esto es, 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 es $k = 0,5 / \lambda_{De}$. Los límites del dominio numérico son $L = 4\pi \lambda_{De}$ y $v_{max} = 8 v_{th}$, y las condiciones de borde, periódicas en x y de Dirichlet en v , son las dadas por las Ecs. 5.6 y 5.7.

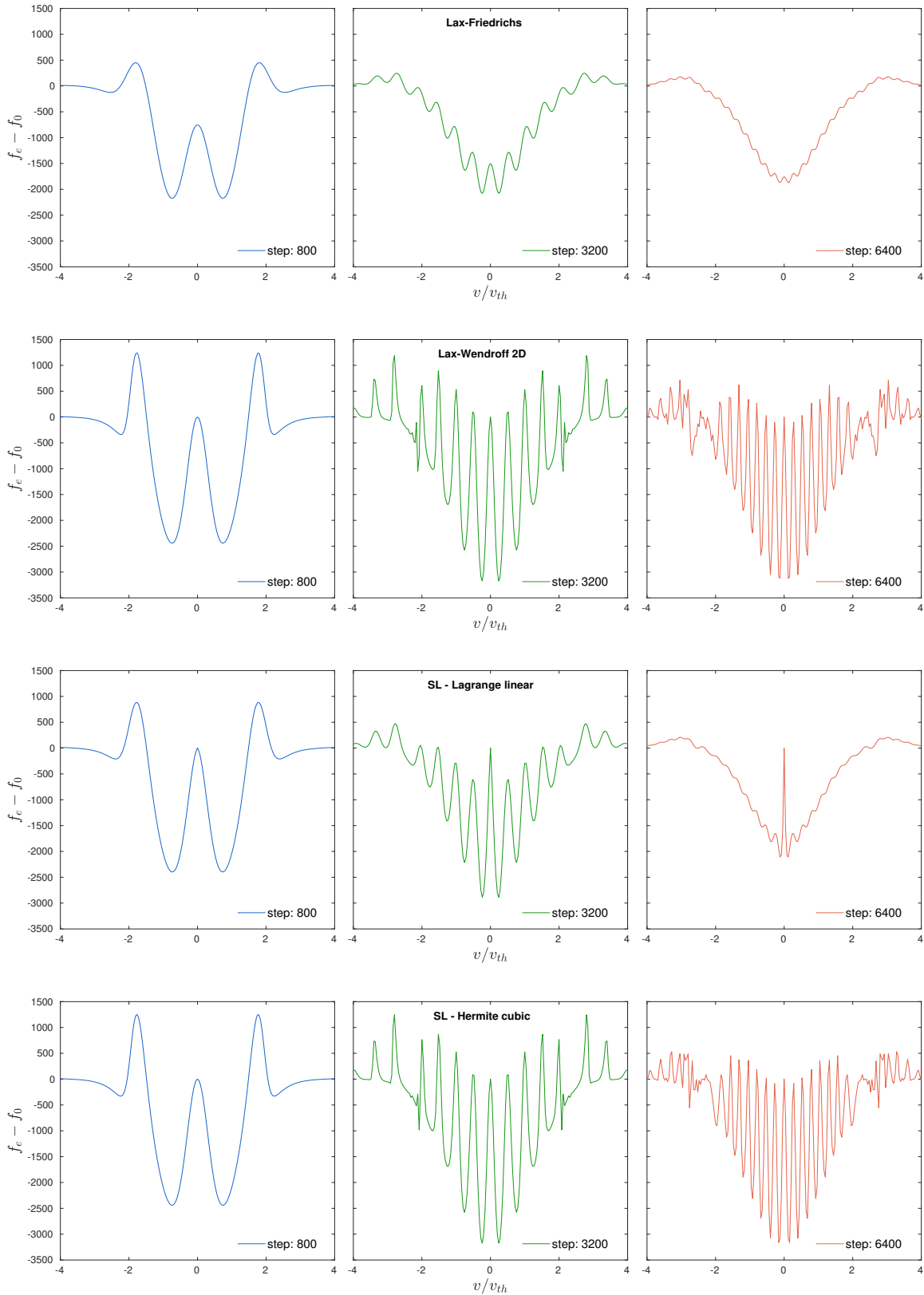


Figura 5.8: Filamentación de la función de distribución en el espacio de velocidades para $t = 5,6 / \omega_{pe}$ (izquierda), $t = 22,6 / \omega_{pe}$ (medio) y $t = 45,2 / \omega_{pe}$ (derecha), en el amortiguamiento no lineal de Landau. Esquemas de arriba a abajo: Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff 2D, SL - Lagrange lineal, y SL - Hermite cúbico.

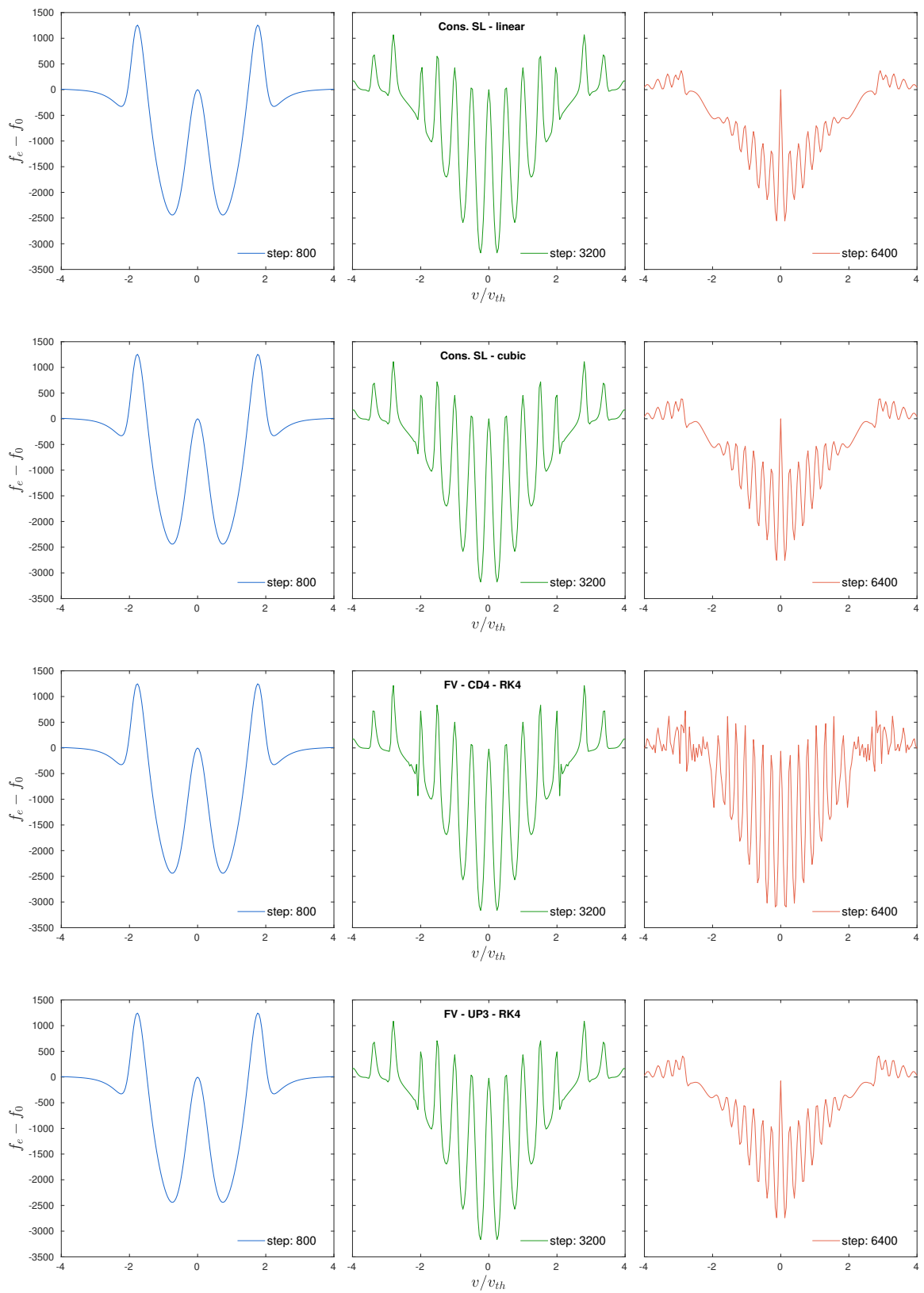


Figura 5.8: Continuación. Esquemas de arriba a abajo: SL conservativo - reconstrucción lineal, SL conservativo - primitiva cúbica, Volúmenes finitos - CD4 - RK4, y Volúmenes finitos - UP3 - RK4.

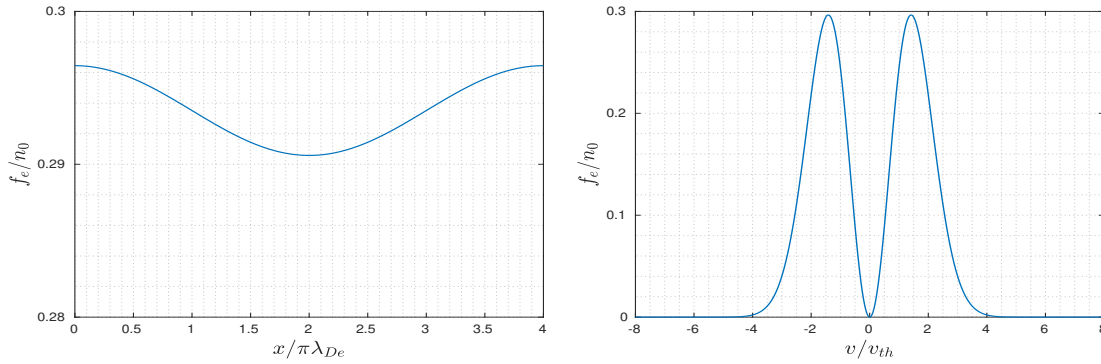


Figura 5.9: Condición inicial **A** para la función de distribución para la inestabilidad de las dos corrientes. Izquierda: sub-espacio físico. Derecha: sub-espacio de velocidades.

En la Fig. 5.10 se muestra la función de distribución en el espacio de fases para una inestabilidad de dos corrientes obtenida a partir de la condición inicial A. La resolución usada es $N_x = 200$, y $N_v = 800$, y el tiempo de simulación es de 4000 pasos de tiempo equivalentes a $t = 28,27 / \omega_{pe}$.

La inestabilidad evoluciona desde una fase lineal hacia una no lineal, en la cual se forma una estructura vorticiosa en el centro del plano de fases. Este tipo de estructura sugiere que la dinámica se encuentra concentrada en la región central del dominio, donde gran parte de las partículas están atrapadas. Luego de un tiempo, los filamentos formados en esta zona serán demasiado finos como para ser capturados por la grilla, ocasionando oscilaciones espurias y la aparición de valores negativos de la función de distribución. Estas oscilaciones no deseadas y los valores negativos no físicos de f son más pronunciados en los esquemas de diferencias finitas y en los de volúmenes finitos con reconstrucciones centradas, ya que estos son los menos disipativos.

En la Figura 5.11 se muestra la evolución temporal del logaritmo de la norma L_2 del campo eléctrico obtenida con distintos esquemas para el caso de la inestabilidad de dos corrientes con la condición A (Eq. 5.9). La línea de puntos representa la tasa de crecimiento aproximada según la teoría lineal. Se puede apreciar que el incremento en la magnitud del campo eléctrico observado en las simulaciones concuerda muy bien con el predicho analíticamente en todos los casos.

Las Figuras 5.12 y 5.13 muestran la evolución temporal de la norma L_2 de la función de distribución y el valor mínimo de f_e , respectivamente. Inicialmente, todos los esquemas conservan de manera correcta la norma $\|f\|_2$ y mantienen el mínimo de f_e muy próximo a 0, pero luego de un tiempo, cuando la filamentación ya no puede ser resuelta en la grilla, $\|f\|_2$ empieza a disminuir mientras que los valores mínimos de la función de distribución se hacen cada vez más negativos. Los esquemas SL conservativos son los que muestran una caída más abrupta de la norma L_2 , no obstante, son los que mejor mantienen la positividad

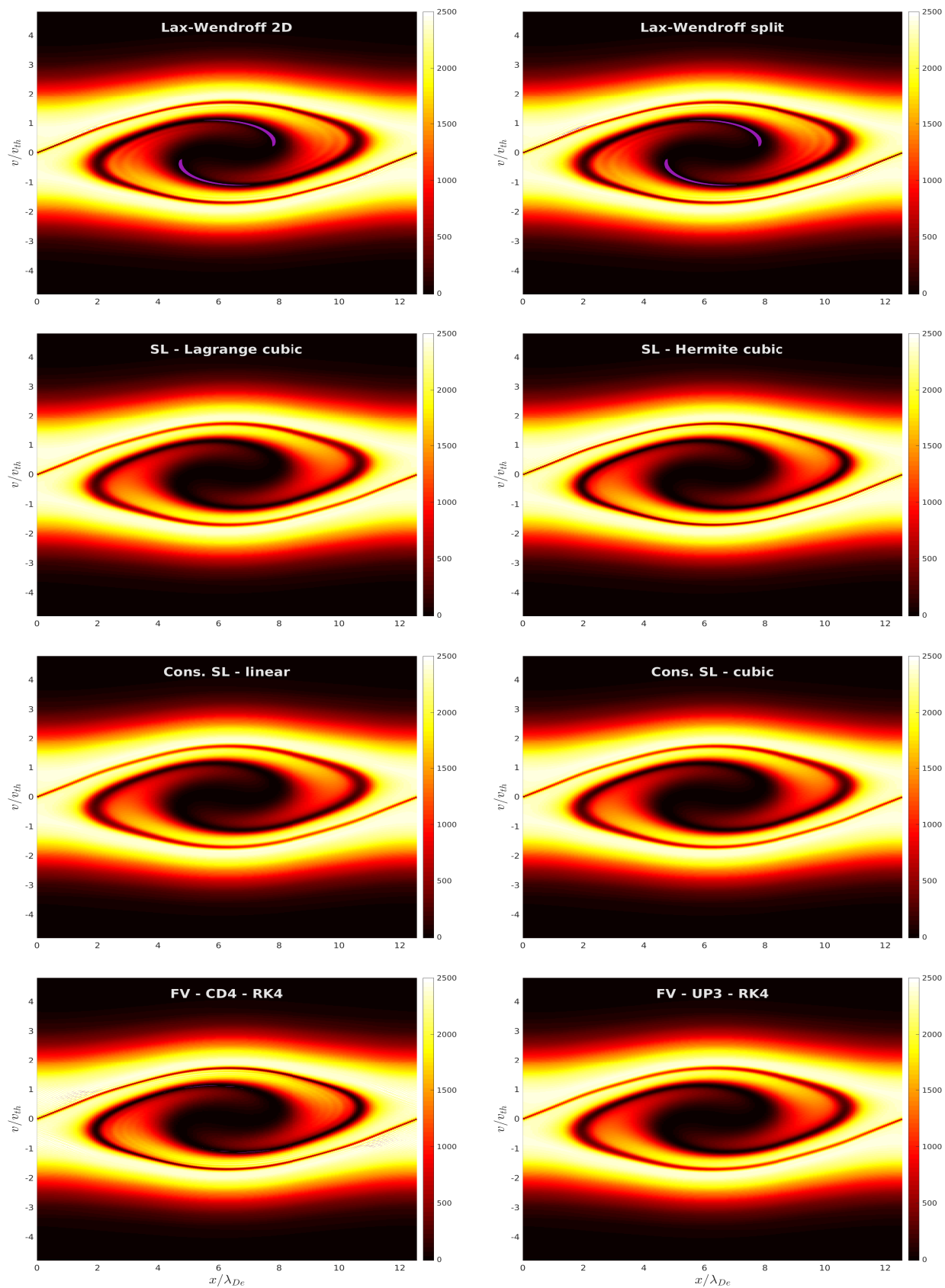


Figura 5.10: Función de distribución electrónica en el espacio de fases para la inestabilidad de las dos corrientes (Condición A). Resolución: $N_x = 200$, $N_v = 800$. Tiempo de simulación: $t = 28,27 / \omega_{pe}$.

de la función de distribución. Los esquemas basados en diferencias finitas conservan $\|f\|_2$ con buena precisión pero rápidamente dan lugar a valores cada vez más negativos de f . Este mismo comportamiento se observa al usar FV con reconstrucciones centradas.

Condición B

La condición inicial para la función de distribución de electrones (ver Fig. 5.14) es:

$$f_e(0, x, v) = \frac{2}{7} f_0(v) \left(1 + 5 \frac{v^2}{v_{th}^2}\right) \left(1 + \alpha \left[\frac{\cos(2kx) + \cos(3kx)}{1,2} + \cos(kx)\right]\right) \quad (5.10)$$

siendo $f_0(v)$ la distribución de Maxwell-Boltzmann dada por la Ec. 5.5. Los demás parámetros del plasma son los mismos que los usados para el amortiguamiento lineal. La amplitud de la perturbación es $\alpha = 0,01$, y la constante de la onda es $k = 0,5/\lambda_{De}$. Los límites del dominio numérico son $L = 4\pi \lambda_{De}$ y $v_{max} = 8 v_{th}$, y las condiciones de borde, periódicas en x y de Dirichlet en v , son las dadas por las Ecs. 5.6 y 5.7.

En la Fig. 5.15 se muestra la función de distribución en el espacio de fases para una inestabilidad de las dos corrientes obtenida a partir de la condición inicial B. La resolución usada es $N_x = 200$, y $N_v = 800$, y el tiempo de simulación es de 8000 pasos de tiempo equivalentes a $t = 56,55/\omega_{pe}$.

Al final de la simulación, algunas estructuras que se desarrollaron en el espacio de fases son demasiado pequeñas como para ser capturadas por la grilla numérica, lo cual genera disipación en algunos esquemas, y oscilaciones espurias en otros. Estas oscilaciones son evidentes en los de diferencias finitas y, principalmente, en el FV - CD4. Por su parte, los SL conservativos no muestran oscilaciones al ser los más disipativos. Puede apreciarse que el método FV con reconstrucción upwind ponderada de tercer orden proporciona los mejores resultados en este caso, al ser poco disipativo pero sin dar lugar a oscilaciones indeseadas.

Condición C

La condición inicial para la función de distribución de electrones (ver Fig. 5.16) es:

$$f_e(0, x, v) = n_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}2v_t} (1 + \alpha \cos(kx)) \left[\exp\left(-\frac{(v - v_b)^2}{2v_t^2}\right) + \exp\left(-\frac{(v + v_b)^2}{2v_t^2}\right) \right] \quad (5.11)$$

siendo $v_t = 0,3 v_{th}$ y $v_b = 0,99 v_{th}$. Los demás parámetros característicos del plasma son los mismos que los usados para el amortiguamiento lineal. La amplitud de la perturbación es $\alpha = 0,05$, y la constante de la onda es $k = 2/13\lambda_{De}$. Los límites del dominio numérico son $L = 13\pi \lambda_{De}$ y $v_{max} = 8 v_{th}$, y las condiciones de borde, periódicas en x y de Dirichlet en v , son las dadas por las Ecs. 5.6 y 5.7.

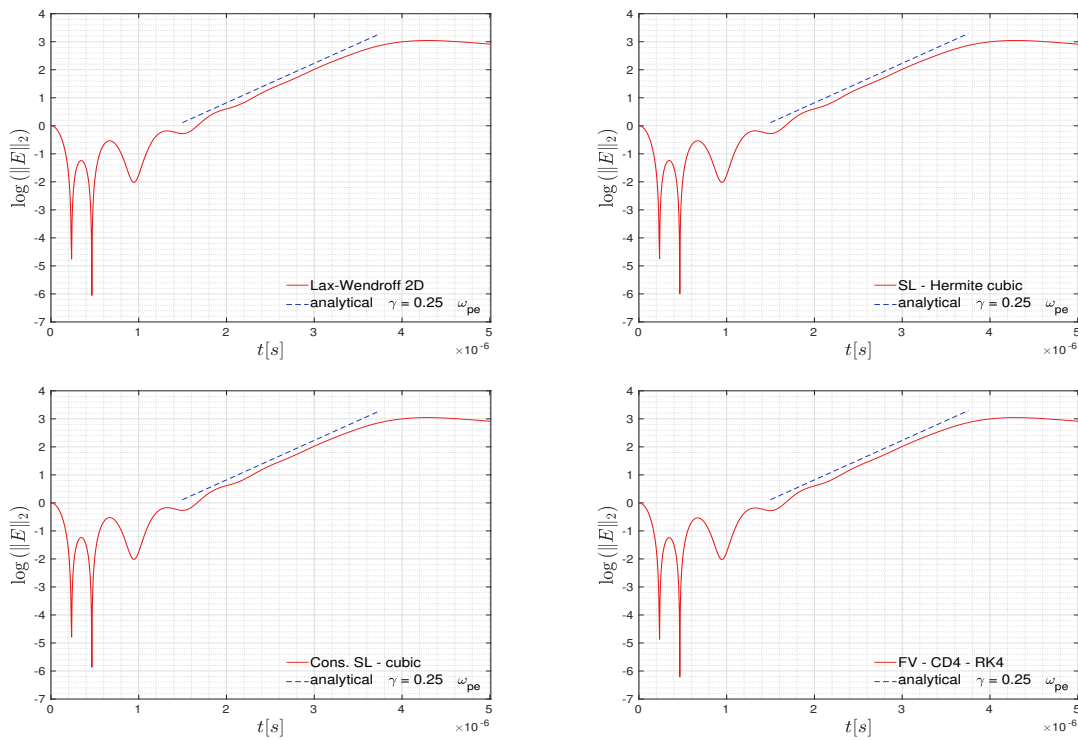


Figura 5.11: Evolución temporal de la norma L_2 de E en la inestabilidad de las dos corrientes (A). Resultados numéricos: línea continua, predicción analítica: línea de trazos.

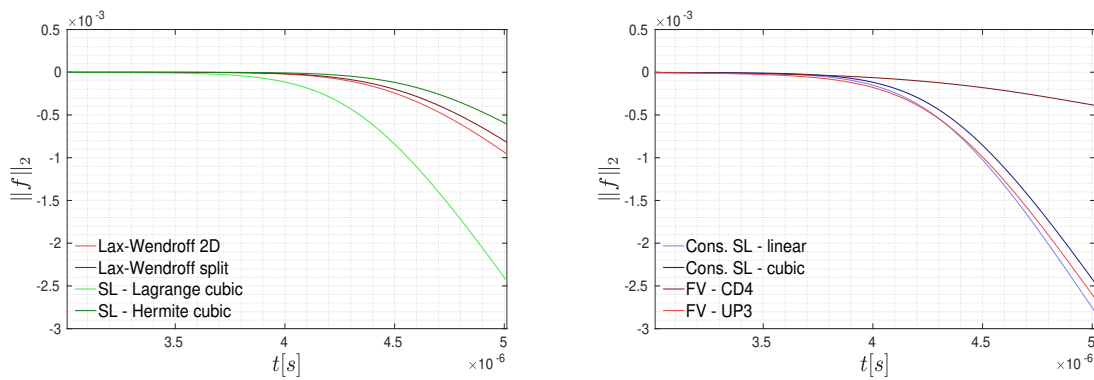


Figura 5.12: Evolución de la norma L_2 de f en la inestabilidad de las dos corrientes (A).

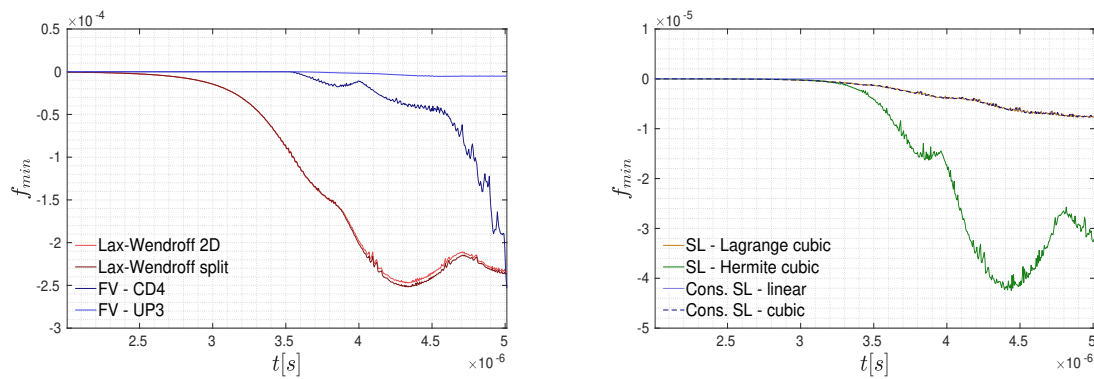


Figura 5.13: Evolución del valor mínimo de f en la inestabilidad de las dos corrientes (A).

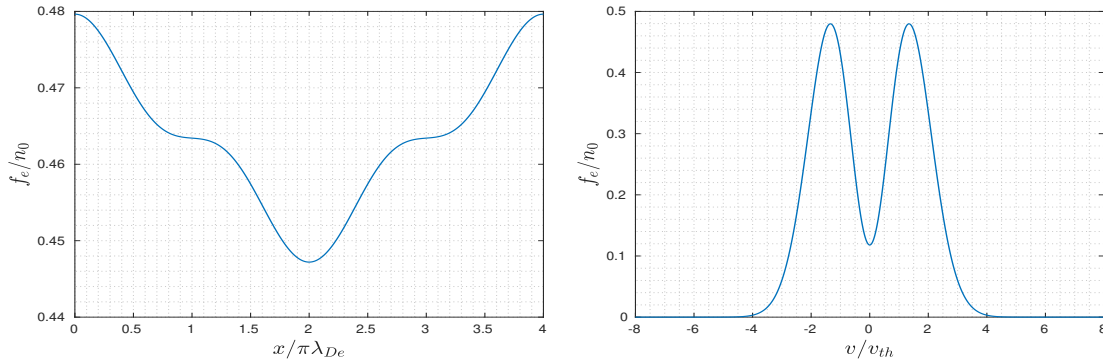


Figura 5.14: Condición inicial **B** para la función de distribución para la inestabilidad de las dos corrientes. Izquierda: sub-espacio físico. Derecha: sub-espacio de velocidades.

En la Fig. 5.17 se muestra la función de distribución en el espacio de fases para una inestabilidad de las dos corrientes obtenida a partir de la condición inicial C. La resolución usada es $N_x = 800$, y $N_v = 800$, y el tiempo de simulación es de 10000 pasos de tiempo equivalentes a $t = 57,43 / \omega_{pe}$. El número de nodos en la dirección de x es mayor que en los casos anteriores dado que la extensión del dominio L es también mayor.

Al igual que en los casos anteriores, se encontró que los esquemas menos disipativos generan oscilaciones no físicas y valores negativos de la función de distribución en el espacio de fases, especialmente los FV con reconstrucción centrada. En los SL conservativos, los valores negativos no son significativos, no obstante, estos esquemas disipan de manera apreciable las pequeñas estructuras que se desarrollan. En este problema, los esquemas SL advectivo con interpolación cúbica de Hermite y FV con reconstrucción UP5 son los que mejor resuelven las características del espacio de fases sin introducir demasiada viscosidad numérica.

En la Figura 5.18 se grafica la evolución temporal del logaritmo del valor máximo del campo eléctrico obtenido con distintos esquemas para el caso de la inestabilidad de dos corrientes (condición inicial C). Todos los métodos proporcionan resultados similares en lo que respecta al comportamiento de E , a los valores máximos alcanzados, y al tiempo en el cual comienza la fase no lineal.

5.4. Inestabilidad Bump-on-tail

La inestabilidad Bump-on-tail de las ondas de Langmuir es otro ejemplo de interacción onda-partículas y una de las inestabilidades más básicas de la física de plasmas. Si un haz de electrones es inyectado en el plasma con una velocidad mayor que su velocidad térmica, entonces la función de distribución de Maxwell-Boltzmann electrónica se verá deformada por una pequeña joroba en su cola como puede verse en la Fig. 5.19. En la zona donde

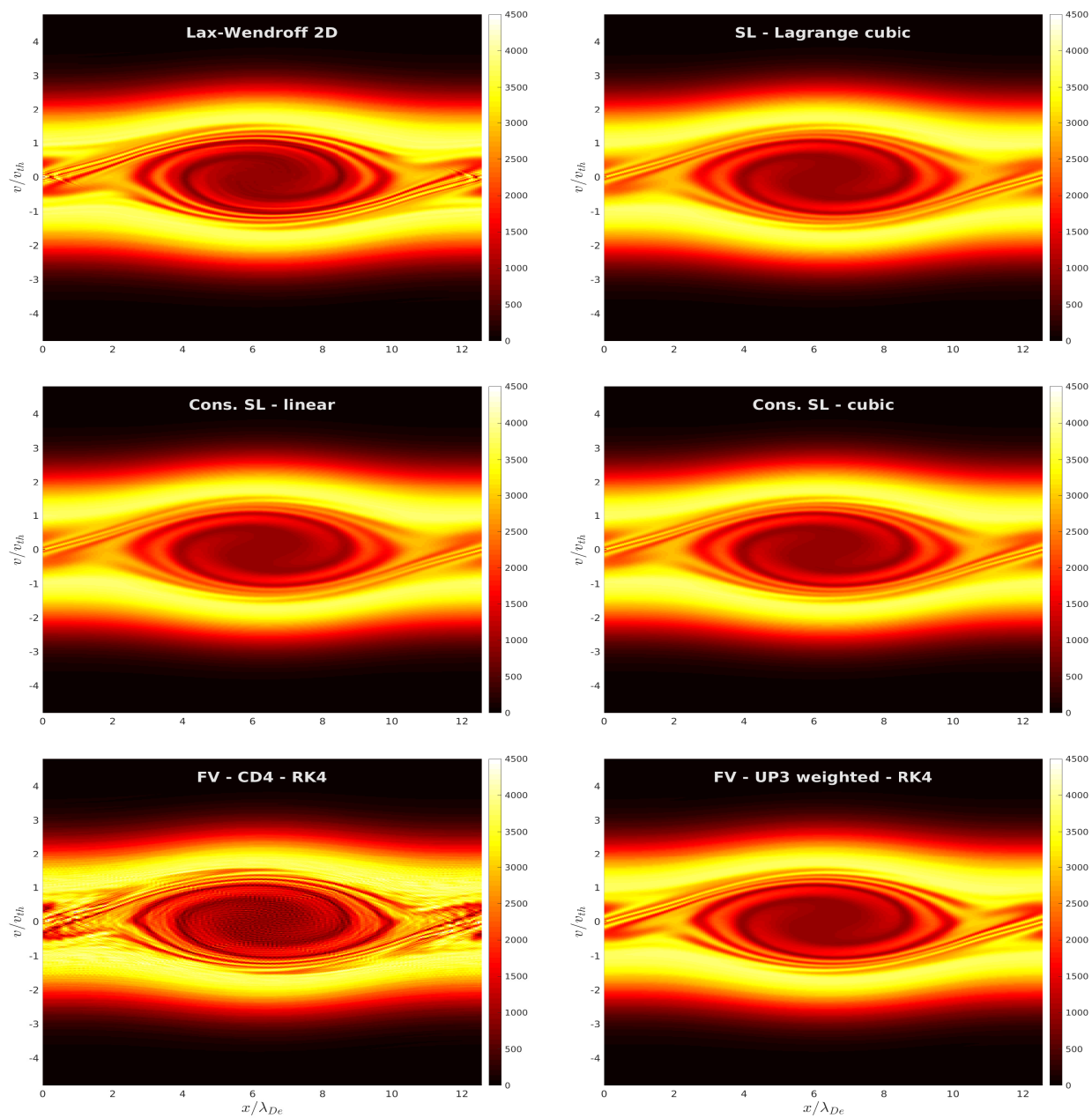


Figura 5.15: Función de distribución electrónica en el espacio de fases para la inestabilidad de las dos corrientes (Condición B). Resolución: $N_x = 200$, $N_v = 800$. Tiempo de simulación: $t = 56,55 / \omega_{pe}$.

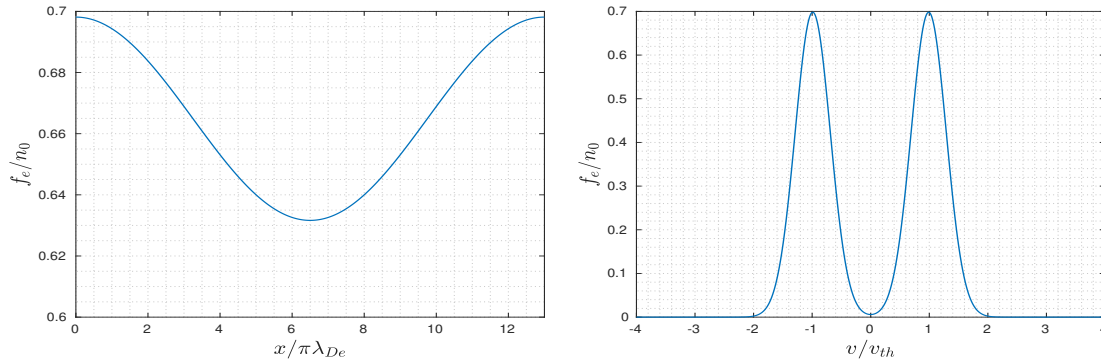


Figura 5.16: Condición inicial **C** para la función de distribución para la inestabilidad de las dos corrientes. Izquierda: sub-espacio físico. Derecha: sub-espacio de velocidades.

la función de distribución tiene pendiente positiva para velocidades positivas, habrá más partículas que se mueven con velocidades levemente mayores, que partículas más lentas. Dicha zona se llama región de ondas inestables (Bittencourt, 2004; Chen, 2016).

Si se introduce una perturbación con velocidad de fase en la región inestable, entonces habrá una transferencia neta de energía desde las partículas resonantes hacia la onda, haciendo que esta crezca inicialmente de manera exponencial. Notar que en este caso ocurre lo opuesto al amortiguamiento de Landau.

Las condiciones iniciales para la simulación numérica de este caso se muestran en la Fig. 5.19. Estas son:

$$f_e(0, x, v) = f_b(v) (1 + \alpha \cos(kx)) \quad (5.12)$$

donde la distribución bum-on-tail es:

$$f_b(v) = n_p f_0(v) + n_b n_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi} v_{th}} \exp\left(-\frac{(v - v_b)^2}{2v_t^2}\right) \quad (5.13)$$

La distribución $f_0(v)$ es la dada por la Ec. 5.5. Los parámetros de la condición inicial son $n_p = 0,9$, $n_b = 0,2$, $v_t = 0,5 v_{th}$ y $v_b = 4,5 v_{th}$. Los demás parámetros del plasma son los mismos que los usados para el amortiguamiento lineal. La amplitud de la perturbación es $\alpha = 0,04$, y la constante de la onda es $k = 0,3 / \lambda_{De}$. Los límites del dominio numérico son $L = 2\pi/0,3 \lambda_{De}$ y $v_{max} = 8 v_{th}$, y las condiciones de borde, periódicas en x y de Dirichlet en v , son las dadas por las Ecs. 5.6 y 5.7.

La resolución usada en este caso es $N_x = 200$, y $N_v = 400$, y el tiempo de simulación es de 40000 pasos de tiempo equivalentes a $t = 471,24 / \omega_{pe}$. La evolución temporal de la energía eléctrica ε_E es mostrada para los diferentes esquemas en la Fig. 5.20. La evolución de ε_E está caracterizada por la composición de dos oscilaciones, una de mayor amplitud relativa y menor frecuencia, y otra de amplitud pequeña y frecuencia mayor.

En todos los casos se observa que la energía eléctrica crece inicialmente hasta alcanzar

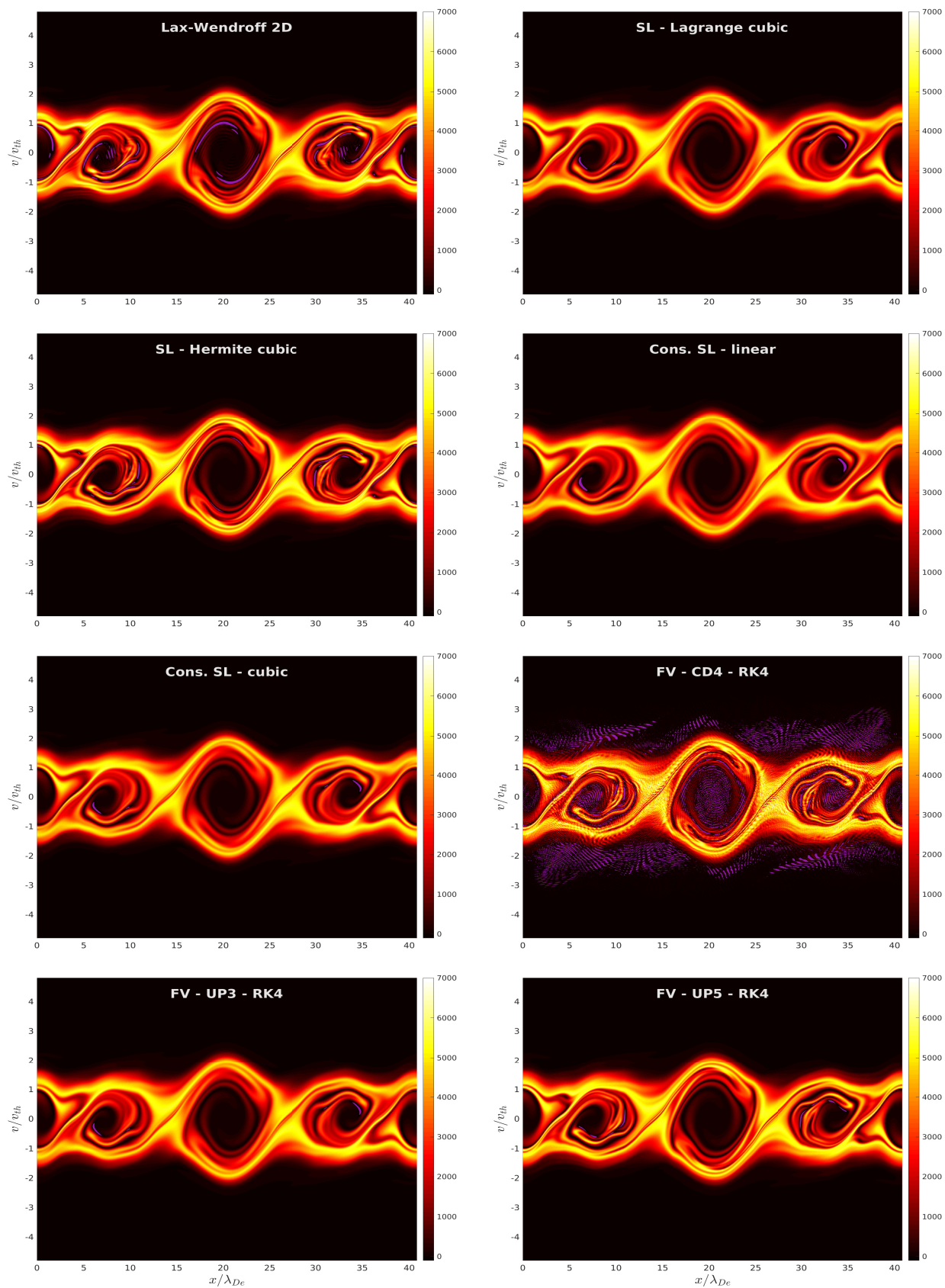


Figura 5.17: Función de distribución electrónica en el espacio de fases para la inestabilidad de las dos corrientes (Condición C). Resolución: $N_x = 800$, $N_v = 800$. Tiempo de simulación: $t = 57,43 / \omega_{pe}$.

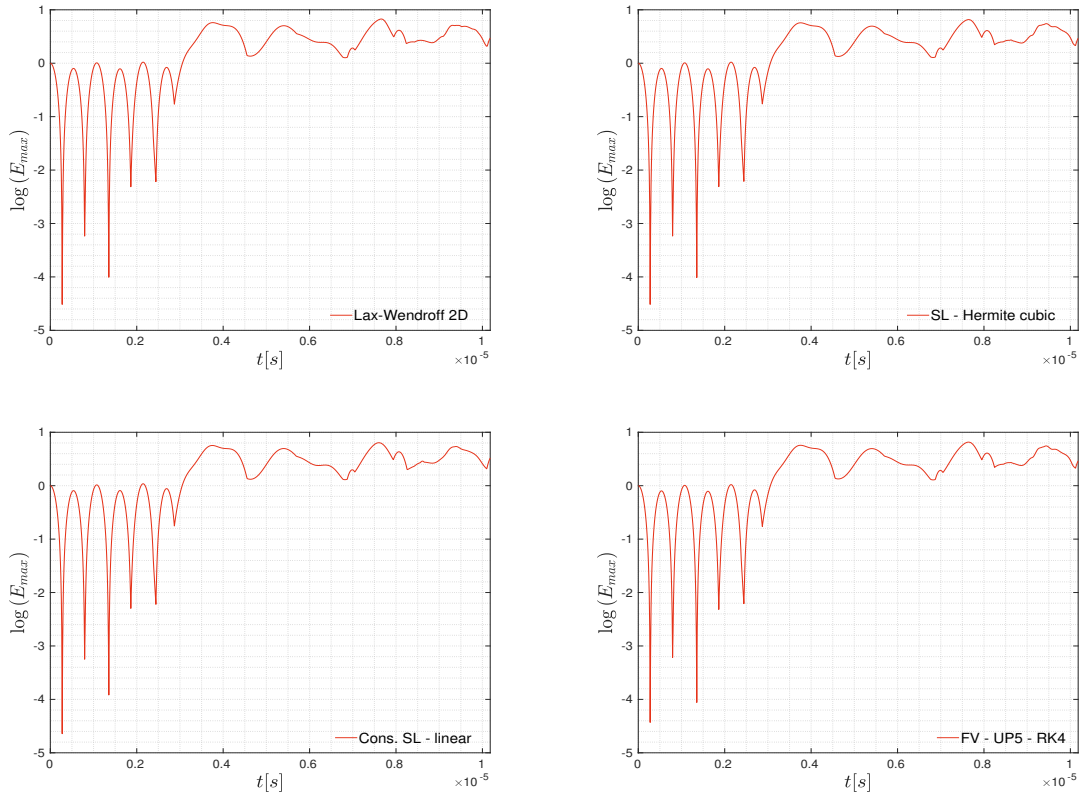


Figura 5.18: Evolución temporal del logaritmo del valor máximo del campo eléctrico en la inestabilidad de las dos corrientes (Condición C).

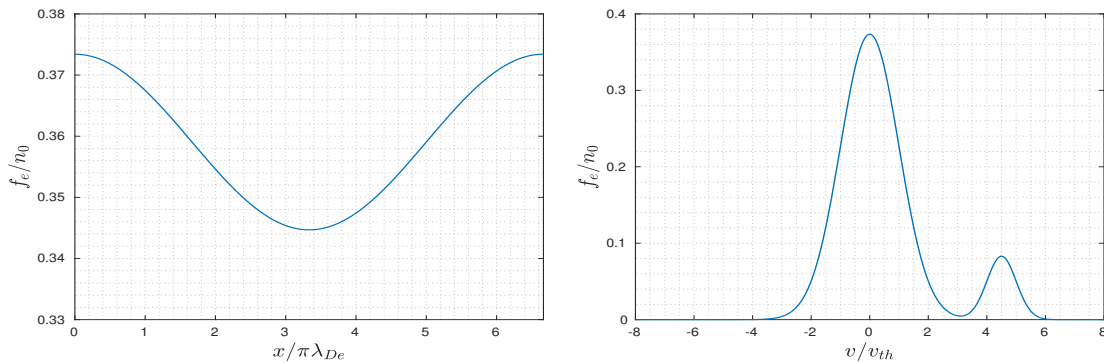


Figura 5.19: Condición inicial para la función de distribución para la inestabilidad bump-on-tail. Izquierda: distribución perturbada en x . Derecha: distribución bump-on-tail f_b en espacio v .

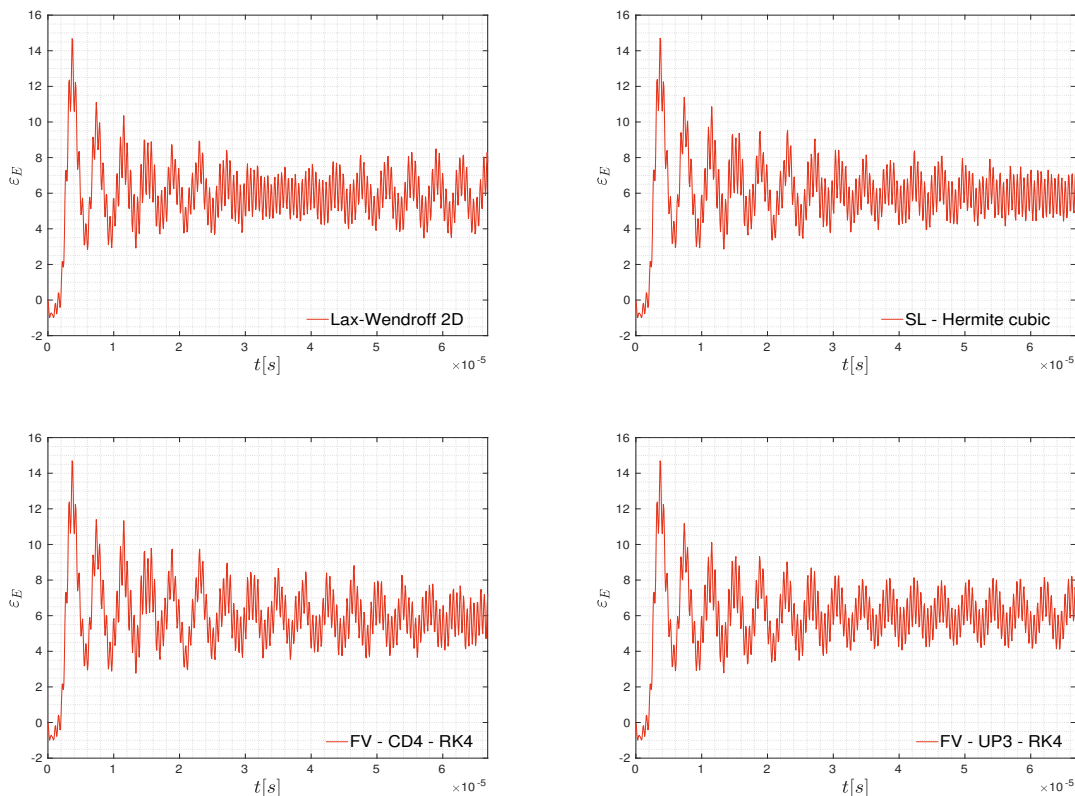


Figura 5.20: Evolución temporal de la energía del campo eléctrico para la inestabilidad bump-on-tail.

un máximo cuyo valor obtenido con los diferentes esquemas es muy similar. Luego del aumento inicial, el campo eléctrico se mantiene oscilando en torno a un valor aproximadamente constante hasta el final de la simulación.

Las Figuras 5.21 y 5.22 muestran la evolución temporal de la norma L_2 de la función de distribución y de la energía total ε_{total} , respectivamente. En cuanto a la conservación de $\|f\|_2$, todos los esquemas presentan un comportamiento similar en el cual dicha norma disminuye inicialmente ($5E-1\%$) para luego mantenerse aproximadamente constante. Por otro lado, las variaciones de la energía total obtenidas al final de la simulación con los esquemas FD, SL y FV, son del orden de $2E-3\%$.

5.5. Una comparación rápida de performance

Hasta el momento no se ha dicho nada acerca del costo computacional asociado con cada esquema. Para dar una idea de la velocidad relativa, se ha medido el tiempo total de ejecución para la resolución de algunos de los casos de pruebas mostrados anteriormente.

Todos los métodos numéricos están implementados computacionalmente en el lenguaje C y programados siguiendo la misma estructura y las mismas reglas. Se han hecho op-

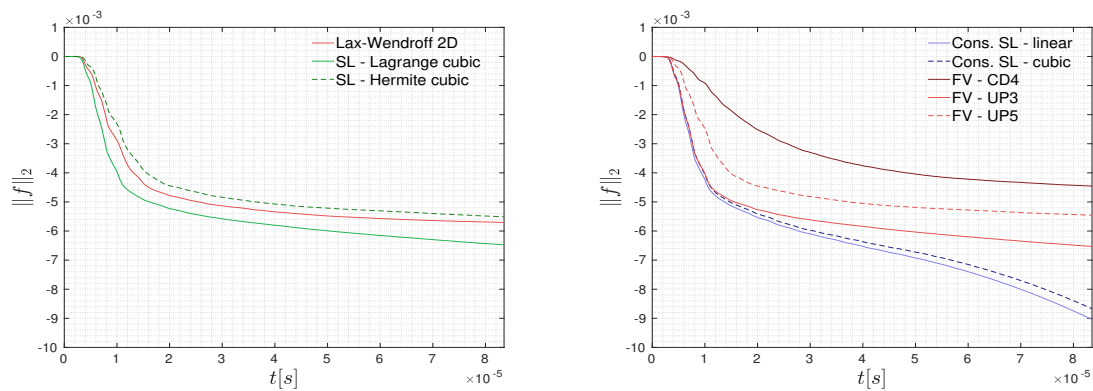


Figura 5.21: Evolución temporal de la norma L_2 de la función de distribución para la inestabilidad bump-on-tail. Comparación entre esquemas.

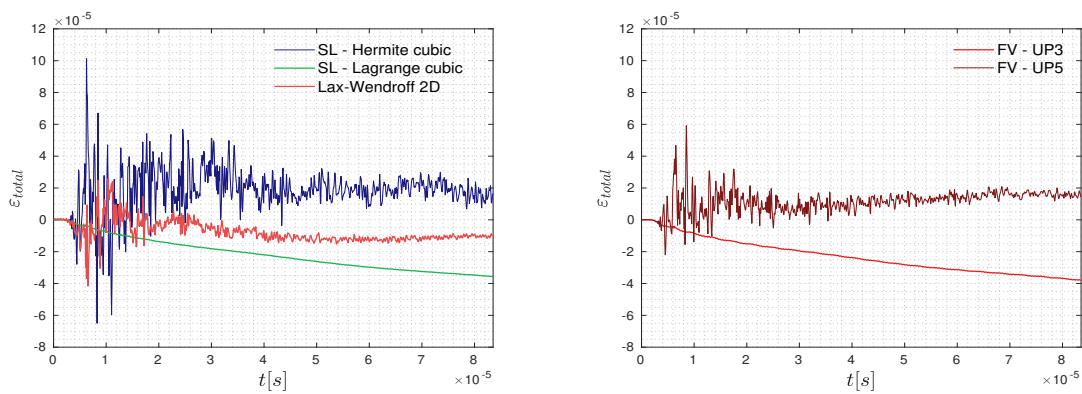


Figura 5.22: Evolución temporal de la energía total para la inestabilidad bump-on-tail. Comparación entre esquemas.

timizaciones secuenciales y las funciones principales están paralelizadas a nivel de datos con instrucciones SIMD, sin embargo, no se ha implementado paralelismo a nivel de hilos (*threads*) lo cual hace esta comparación un poco más limpia. Agregar a los programas la capacidad para ejecutarse simultáneamente en varios núcleos, a partir de una descomposición del dominio, será una mejora necesaria para la simulación de problemas en más dimensiones del espacio de fases.

La tabla siguiente muestra los tiempos totales de ejecución (en segundos) demandados por los distintos esquemas para simular los problemas del amortiguamiento lineal de Landau, el amortiguamiento no lineal y la inestabilidad de las dos corrientes con la condición inicial C. Las simulaciones fueron hechas en un núcleo *Sandy Bridge* a 2,8 GHz, y los códigos fueron compilados con el compilador *GCC 9.2.1* usando las siguientes opciones: `-std=c18 -march=native -O2 -fipa-pta -flto -funsafe-math-optimizations -ftree-vectorize`.

Método / Problema	LD lineal	LD no lineal	TSI C
	100 × 200 <i>steps</i> : 4000	200 × 400 <i>steps</i> : 8000	800 × 800 <i>steps</i> : 10000
Lax-Friedrichs	2,13 s	7,29 s	—
L-W 2D	2,32 s	8,49 s	81,3 s
MacCormack	2,61 s	10,6 s	—
L-W split	2,56 s	10,1 s	127. s
SL - Lagrange 1	2,51 s	9,89 s	—
SL - Lagrange 3	2,79 s	12,0 s	145. s
SL - Hermite 3	2,99 s	13,3 s	162. s
SL - Splines 3	44,2 s	646. s	—
Cons. SL - linear	2,92 s	14,0 s	194. s
Cons. SL - cubic	3,05 s	15,0 s	200. s
Cons. SL - cubic w/ limiter	10,6 s	74,8 s	—
FV - CD4 - RK4	4,94 s	32,4 s	420. s
FV - CD2 - RK4	4,15 s	26,1 s	—
FV - UP3 - RK4	4,74 s	31,1 s	402. s
FV - UP5 - RK4	5,88 s	40,7 s	—
FV - UP3 weighted - RK4	20,4 s	162. s	—

Cuadro 5.2: Comparación de tiempos de ejecución.

Los esquemas de diferencias finitas son los que tienen el menor costo computacional, seguidos de cerca por los SL con interpolación polinómica y los SL conservativos sin funciones limitadoras. Al usar interpolación con splines cúbicos, el tiempo de ejecución aumenta entre uno y dos órdenes de magnitud debido que interpolar cada punto unidimensional requiere de la resolución de un sistema de ecuaciones lineales. Este inconveniente se agrava aun más cuando se hace una descomposición del dominio, ya que al ser no local, cada interpolación agrega una cantidad significativa de comunicación entre los procesos. En el

caso de los SL conservativos, el cálculo de las funciones limitadoras causa que cada paso demande entre 4 y 6 veces más tiempo.

El costo computacional de los esquemas de volúmenes finitos no es sensible al tipo de reconstrucción usada, siendo la diferencia entre el CD2 y el UP5 de un 40%. En el caso de emplear el esquema ponderado de Banks (Banks y Hittinger, 2010), el tiempo de ejecución aumenta entre 4 y 5 veces como consecuencia del cálculo de los pesos.

Capítulo 6

Métodos numéricos para Vlasov-Poisson en coordenadas cilíndricas

En este capítulo se introducirán métodos numéricos para la ecuación de Vlasov escrita en coordenadas cilíndricas y definida sobre un espacio de fases de cuatro dimensiones $(r, \theta, v_r, v_\theta)$. El sistema de ecuaciones Vlasov-Poisson se escribe respecto de este sistema de coordenadas como:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_r \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_r} + \left(a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_\theta} = 0 \quad (6.1)$$

$$\mathbf{a}(t, r, \theta) = \frac{q}{m} \mathbf{E}(t, r, \theta) \quad (6.2)$$

$$E_r(t, r, \theta) = -\frac{\partial \phi}{\partial r} \quad (6.3)$$

$$E_\theta(t, r, \theta) = -\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \quad (6.4)$$

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (6.5)$$

$$\rho(t, r, \theta) = \sum_s q_s \iint f_s(t, r, \theta, v_r, v_\theta) dv_r dv_\theta \quad (6.6)$$

donde la primera ecuación (6.1) es la forma de Liouville de la ecuación de Vlasov en coordenadas cilíndricas, la Ec. 6.2 es la fuerza de Lorentz, las Ecs. 6.3 y 6.4 son la definición del potencial electrostático ϕ , la Ec. 6.5 es la ecuación de Poisson en coordenadas cilíndricas, y la última (6.6), es la integral de la función de distribución sobre el espacio de velocidades para determinar la densidad de carga, también llamada momento cero de f_s .

En principio, el objetivo es simular problemas axialmente simétricos, por lo cual no se tendrán en cuenta las variaciones a lo largo de la coordenada azimutal (θ). Si bien, en este caso, la función de distribución, el campo eléctrico y demás variables son independientes de θ , es muy importante tener en cuenta la existencia de esta coordenada ya que define el dominio de cálculo e interviene en la integración de los flujos en los métodos de volúmenes finitos.

Se describirán, implementarán y compararán esquemas basados en diferencias finitas y volúmenes finitos para discretizar y resolver la ecuación de Vlasov. Al igual que se hizo en coordenadas cartesianas, el esquema para resolver la ecuación de Poisson será el mismo en todos los casos: un esquema de diferencias finitas centrado de cuarto orden.

Los métodos semi-Lagrangianos, tanto advectivos como aquellos conservativos basados en volúmenes finitos, han mostrado ser muy versátiles y eficientes para la resolución de la ecuación de Vlasov no relativista, sin campos magnéticos y en coordenadas cartesianas. Además, el paso de tiempo no está restringido por una condición de estabilidad tipo CFL como si ocurre en el caso de los demás métodos Eulerianos explícitos. Sin embargo, estas virtudes se ven disminuidas en otras situaciones en las cuales el procedimiento de splitting temporal no es aplicable, como por ejemplo, en la aproximación del centro de guía o en el caso relativista.

Cuando la ecuación de Vlasov se escribe sobre una geometría cilíndrica, ocurre un problema similar ya que los términos correspondientes a la aceleración centrífuga y de Coriolis impiden aplicar el splitting en el espacio de velocidades de forma tan directa. Para afrontar este inconveniente, es posible realizar advecciones bidimensionales en el espacio de velocidades, lo cual requiere de una interpolación 2D que puede efectuarse mediante el producto tensorial de B-splines (Shoucri et al., 2003, 2004; Sonnendrücker et al., 1999). Este tipo de interpolación, si bien precisa, es muy costosa y no local, lo cual disminuye la eficiencia de la paralelización por descomposición de dominio.

Por estos motivos, los métodos semi-Lagrangianos son excluidos del presente capítulo sobre métodos numéricos para el sistema Vlasov-Poisson en coordenadas cilíndricas pero se tendrán muy en cuenta como trabajos futuros.

6.1. Esquema para la ecuación de Poisson 1D

Con el objetivo de determinar el potencial electrostático y, consecuentemente, el campo eléctrico, se resuelve la ecuación de Poisson (Ec. 6.5) con las densidades de carga como fuentes. Para ello, se emplea un esquema de diferencias finitas centradas de cuarto orden ya que es fácil de implementar y se extiende rápidamente a dimensiones mayores. Otra virtud, es que su orden puede modificarse a voluntad solamente cambiando el stencil que se elige para aproximar las derivadas espaciales.

La discretización del dominio espacial unidimensional consiste en un conjunto de N nodos espaciados uniformemente desde un radio interior r_0 hasta un radio exterior r_{max} . Como la principal aplicación práctica de los códigos desarrollados en coordenadas cilíndricas será el estudio de sondas de Langmuir y amarras espaciales electrodinámicas, se asume siempre que $r_0 > 0$, ya que este radio sería el correspondiente al radio de la sonda o del cable. Es posible estudiar la situación con $r_0 = 0$, pero debe tenerse un cuidado especial en la aplicación de las condiciones de borde en este extremo.

Se denota como ϕ_i a la aproximación numérica de $\phi(t, r)$ en el punto $r_i = r_0 + i\Delta r$ para $0 \leq i \leq N - 1$. Para formular el esquema de diferencias finitas, se aproximan en cada nodo las derivadas primera y segunda que aparecen en la Ec. 6.5 mediante fórmulas centradas de cuarto orden, a saber:

$$\frac{\partial \phi}{\partial r}(t, r_i) = \frac{8(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+2} - \phi_{i-2})}{12\Delta r} + \mathcal{O}(\Delta r^4) \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2}(t, r_i) = \frac{-\phi_{i-2} + 16\phi_{i-1} - 30\phi_i + 16\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{12\Delta r^2} + \mathcal{O}(\Delta r^4) \quad (6.8)$$

Introduciendo estas aproximaciones en la Ec. 6.5 se obtiene la versión discretizada de la ecuación de Poisson:

$$\begin{aligned} & \frac{-\phi_{i-2} + 16\phi_{i-1} - 30\phi_i + 16\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{12\Delta r^2} \\ & + \frac{8(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+2} - \phi_{i-2})}{r_i 12\Delta r} = -\frac{\rho_i}{\epsilon_0} \end{aligned} \quad (6.9)$$

donde $\rho_i = \rho(t, r_i)$. La expresión anterior (Ec. 6.9) es válida para los puntos interiores solamente, es decir, para $i \in [2, N - 3]$. Para tener en consideración los valores cercanos a los bordes, será necesario imponer condiciones de borde, las cuales nos darán 4 ecuaciones adicionales.

El conjunto de las $N - 4$ ecuaciones 6.9 correspondientes a cada uno de los puntos interiores, más las 4 ecuaciones correspondientes a las condiciones de borde, proporcionan un sistema de N ecuaciones lineales con N incógnitas. Como consecuencia del stencil usado para aproximar las derivadas, el sistema resultante tiene estructura penta-diagonal.

Las condiciones de borde que se usarán más adelante en los problemas de prueba serán de Dirichlet, esto es, ϕ_0 y ϕ_{N-1} iguales a valores conocidos que pueden, o no, ser constantes en el tiempo. Se puede apreciar que como el stencil elegido es de cuarto orden, estas dos condiciones no son suficientes, sino que debe tenerse una consideración particular en los puntos extremos r_1 y r_{N-2} . Algunas alternativas son reducir el orden de la aproximación para las derivadas cerca de los bordes, o usar diferencias finitas laterales hacia adelante en r_1 , y hacia atrás en r_{N-2} .

Si se asumen conocidos los valores de ϕ en los límites del dominio, y se usan fórmulas

laterales de tercer orden para los puntos cercanos a los contornos, entonces las cuatro ecuaciones adicionales son:

$$\phi_0 = \phi_p \tag{6.10}$$

$$\phi_{N-1} = 0 \tag{6.11}$$

$$\begin{aligned} & \frac{-11\phi_1 + 18\phi_2 - 9\phi_3 + 2\phi_4}{r_1 6\Delta r} \\ & + \frac{35\phi_1 - 104\phi_2 + 114\phi_3 - 56\phi_4 + 11\phi_5}{12\Delta r^2} = -\frac{\rho_1}{\epsilon_0} \end{aligned} \tag{6.12}$$

$$\begin{aligned} & \frac{11\phi_{N-2} - 18\phi_{N-3} + 9\phi_{N-4} - 2\phi_{N-5}}{r_{N-2} 6\Delta r} \\ & + \frac{35\phi_{N-2} - 104\phi_{N-3} + 114\phi_{N-4} - 56\phi_{N-5} + 11\phi_{N-6}}{12\Delta r^2} = -\frac{\rho_{N-2}}{\epsilon_0} \end{aligned} \tag{6.13}$$

Luego, el sistema de ecuaciones lineales generado por las Ecs. 6.9 - 6.13 se puede escribir matricialmente como:

$$[K_1 + K_2] \phi = F_\rho \tag{6.14}$$

donde:

$$K_1 = \frac{1}{12\Delta r} \begin{bmatrix} 0 & \frac{-22}{r_1} & \frac{36}{r_1} & \frac{-18}{r_1} & \frac{4}{r_1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{1}{r_2} & \frac{-8}{r_2} & 0 & \frac{8}{r_2} & \frac{-1}{r_2} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r_3} & \frac{-8}{r_3} & 0 & \frac{8}{r_3} & \frac{-1}{r_3} & 0 & \dots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{r_{N-4}} & \frac{-8}{r_{N-4}} & 0 & \frac{8}{r_{N-4}} & \frac{-1}{r_{N-4}} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{1}{r_{N-3}} & \frac{-8}{r_{N-3}} & 0 & \frac{8}{r_{N-3}} & \frac{-1}{r_{N-3}} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{-4}{r_{N-2}} & \frac{18}{r_{N-2}} & \frac{-36}{r_{N-2}} & \frac{22}{r_{N-2}} & 0 \end{bmatrix} \tag{6.15}$$

$$K_2 = \frac{1}{12\Delta r^2} \begin{bmatrix} 0 & 35 & -104 & 114 & -56 & 11 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 16 & -30 & 16 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 16 & -30 & 16 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 16 & -30 & 16 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 16 & -30 & 16 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & 11 & -56 & 114 & -104 & 35 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.16}$$

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_p \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \phi_{N-3} \\ \phi_{N-2} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F_\rho = -\frac{1}{\epsilon_0} \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ \rho_{N-4} \\ \rho_{N-3} \\ \rho_{N-2} \end{bmatrix} \quad (6.17)$$

Para la resolución numérica del sistema de ecuaciones anterior (Ec. 6.14), se hace una descomposición LU de la matriz de coeficientes completa $[K_1 + K_2]$, y luego se usan las matrices triangulares para determinar el vector de los potenciales por sustitución. Una vez obtenidos los potenciales, se determinan los valores del campo electrostático en la dirección de r a partir de la definición del potencial (Ec. 6.3). Nuevamente, esto se hace aproximando la derivada primera por una fórmula de diferencias finitas centradas de cuarto orden:

$$E_i = -\frac{8(\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) - (\phi_{i+2} - \phi_{i-2})}{12\Delta r} \quad (6.18)$$

Como no es posible emplear esta expresión en los nodos próximos a los contornos, se usan diferencias finitas laterales de cuarto orden en los puntos r_0 , r_1 , r_{N-2} y r_{N-1} , esto es:

$$E_1 = -\frac{-25\phi_1 + 48\phi_2 - 36\phi_3 + 16\phi_4 - 3\phi_5}{12\Delta r} \quad (6.19)$$

$$E_{N-2} = -\frac{25\phi_{N-2} - 48\phi_{N-3} + 36\phi_{N-4} - 16\phi_{N-5} + 3\phi_{N-6}}{12\Delta r} \quad (6.20)$$

En los problemas de prueba que se simularán en el capítulo siguiente no será necesario calcular los campos eléctricos en los límites del dominio (r_0 y r_{N-1}), dado que los valores de la función de distribución en estos puntos no serán evolucionados según la ecuación de Vlasov, sino que estarán prescritos por condiciones de borde de Dirichlet.

6.2. Esquemas de diferencias finitas

Una característica usualmente aceptada de los métodos basados en diferencias finitas es que pueden volverse inestables ante la filamentación del espacio de fases, o en la simulación de problemas no lineales, especialmente para tiempos largos. En el capítulo anterior hemos mostrado, a través de una amplia variedad de problemas de prueba, que este no siempre es el caso. Si bien pueden presentar oscilaciones espurias, valores negativos de la función de distribución y malas propiedades de conservación de las partículas, no se ha encontrado

que se vuelvan inestables. Aun si las oscilaciones fueran excesivas, estos métodos pueden estabilizarse agregando un término de colisiones elegido cuidadosamente.

Los métodos de diferencias finitas se han usado previamente en coordenadas cilíndricas para el estudio de la recolección de corriente en sondas de Langmuir cilíndricas (Lorenzon et al., 2016a,b; Sánchez-Arriaga, 2013; Sánchez-Arriaga y Pastor-Moreno, 2014). El esquema utilizado es esencialmente de primer orden en el espacio y usa un integrador explícito de tercer orden en el tiempo, el cual ha resultado ser estable para la simulación del problema fuertemente no lineal que consiste en una sonda de Langmuir cilíndrica sumergida en un plasma en equilibrio, y cuyo potencial es cambiado abruptamente desde cero hasta un valor relativamente grande. Este esquema es descripto brevemente a continuación.

6.2.1. Un esquema estable de primer orden

Se trata de uno de los esquemas más simples que es posible construir para resolver la ecuación de Vlasov cilíndrica. Antes de describir el esquema, se introduce cierta nomenclatura útil. Todas las mallas que se usan son fijas en el tiempo y uniformes en el espacio, siendo Δr , Δv_r y Δv_θ , los espaciamientos entre nodos en la dirección espacial r y en las de velocidad v_r y v_θ , respectivamente. Sea $f_{i,k,l}^n$ la aproximación numérica de $f(t, r, v_r, v_\theta)$ en el punto $(r_i, v_{r_k}, v_{\theta_l})$, donde $r_i = i\Delta r$, $v_{r_k} = k\Delta v_r$ y $v_{\theta_l} = l\Delta v_\theta$, y en el instante de tiempo $t^n = n\Delta t$.

En primer lugar, reescribimos la Ec. 6.1 bajo la suposición axialmente simétrica de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= -v_r \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{v_\theta^2}{r} \frac{\partial f}{\partial v_r} - a_r \frac{\partial f}{\partial v_r} + \frac{v_r v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \\ &= rhs(t, r, v_r, v_\theta, f) \end{aligned} \quad (6.21)$$

Donde el lado derecho $rhs(t, r, v_r, v_\theta, f)$ se compone de cuatro términos. El esquema consiste en aproximar las derivadas que aparecen en cada uno de los términos por fórmulas de diferencias finitas de primer y segundo orden, centradas y laterales.

Primer término: upwind de primer orden

$$\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{f_{i+1,k,l} - f_{i,k,l}}{\Delta r}, \quad \text{si } v_r < 0 \quad (6.22)$$

$$\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{f_{i,k,l} - f_{i-1,k,l}}{\Delta r}, \quad \text{si } v_r > 0 \quad (6.23)$$

Segundo término: backward de segundo orden

$$\frac{\partial f}{\partial v_r} = \frac{3f_{i,k,l} - 4f_{i,k-1,l} + f_{i,k-2,l}}{2\Delta v_r} \quad (6.24)$$

Tercer término: upwind de segundo orden

$$\frac{\partial f}{\partial v_r} = \frac{-3f_{i,k,l} + 4f_{i,k+1,l} - f_{i,k+2,l}}{2\Delta v_r}, \quad \text{si } a_r < 0 \quad (6.25)$$

$$\frac{\partial f}{\partial v_r} = \frac{3f_{i,k,l} - 4f_{i,k-1,l} + f_{i,k-2,l}}{2\Delta v_r}, \quad \text{si } a_r > 0 \quad (6.26)$$

Cuarto término: central de segundo orden

$$\frac{\partial f}{\partial v_\theta} = \frac{f_{i,k,l+1} - f_{i,k,l-1}}{2\Delta v_\theta} \quad (6.27)$$

Si bien emplean una variedad de diferencias finitas de diferente orden y stencil, el término advectivo en el espacio, que es un término predominante, se discretiza con una fórmula de primer orden, por lo que el esquema es esencialmente de primer orden en el espacio. Una vez hechas las aproximaciones (6.22 - 6.27), queda determinado el lado derecho de la Ec. 6.21. Luego, la integración temporal se lleva a cabo empleando un Runge-Kutta explícito de tercer orden.

Desde el punto de vista computacional, este algoritmo tiene bajo costo y es fácilmente paralelizable a nivel de hilos por descomposición del dominio, pero su paralelismo a nivel de datos se ve dificultado por el uso de discretizaciones upwind, cuyo stencil en cada nodo depende del signo de la velocidad local de advección.

6.2.2. El esquema de Lax-Wendroff

Siguiendo el mismo procedimiento que se siguió en coordenadas cartesianas, se puede derivar un esquema de tipo Lax-Wendroff para la ecuación en coordenadas cilíndricas. En primer lugar se expande la función de distribución $f(t, r, v_r, v_\theta)$ en series de Taylor en el tiempo y se conservan los términos de hasta segundo orden, esto es:

$$f_{i,k,l}^{n+1} = f_{i,k,l}^n + \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{i,k,l}^n \Delta t + \left[\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right]_{i,k,l}^n \frac{\Delta t^2}{2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \quad (6.28)$$

Luego, la derivada temporal primera se escribe en función de derivadas espaciales mediante la ecuación de Vlasov (Ec. 6.21). Para expresar la derivada temporal segunda en términos de derivadas espaciales, se deriva la Ec. 6.21 respecto del tiempo:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = -v_r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) - \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{\partial}{\partial v_r} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) + \frac{v_r v_\theta}{r} \frac{\partial}{\partial v_\theta} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) - \frac{\partial a_r}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial v_r} \quad (6.29)$$

Donde el orden de las derivadas espaciales y temporales puede intercambiarse teniendo en cuenta que son variables independientes. Sustituyendo nuevamente las derivadas temporales primeras por la Ec. 6.21, y llevando a cabo las derivadas, resulta la expresión para

la derivada segunda:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} &= v_r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial v_r^2} + \left(\frac{v_r v_\theta}{r} \right)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial v_\theta^2} + 2v_r \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{\partial^2 f}{\partial r \partial v_r} \\
 &\quad - 2v_r \left(\frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{\partial^2 f}{\partial r \partial v_\theta} - 2 \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \left(\frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{\partial^2 f}{\partial v_r \partial v_\theta} \\
 &\quad + \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial r} + v_r \left(\frac{\partial a_r}{\partial r} - \frac{v_\theta^2}{r^2} \right) \frac{\partial f}{\partial v_r} - \left(\frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{2v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial v_r} \\
 &\quad + v_r \left(\frac{v_r v_\theta}{r^2} \right) \frac{\partial f}{\partial v_\theta} - \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial v_\theta} + \left(\frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{v_r}{r} \frac{\partial f}{\partial v_\theta} - \frac{\partial a_r}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial v_r}
 \end{aligned} \tag{6.30}$$

Si se reemplaza la expresión anterior (Ec. 6.30), junto con la Ec. 6.21, en la expansión 6.28, se obtiene una forma de determinar el valor de f en el tiempo $t + \Delta t$ a partir de los valores de f y sus derivadas espaciales en el instante t , la cual es de segundo orden en el tiempo. Para llegar a la versión completamente discreta del esquema, estas derivadas espaciales primeras, segundas y cruzadas se aproximan mediante fórmulas de diferencias finitas centradas de segundo orden.

Como veremos en el capítulo siguiente, este esquema parece en principio estable, pero conduce rápidamente a inestabilidades ante problemas no lineales a causa de su falta de disipación. Una alternativa para afrontar este problema será el uso de diferencias finitas de tipo upwind de segundo orden en lugar de centradas. Es bien conocido que los stencil de tipo upwind agregan disipación artificial, la que ayuda a reducir los errores numéricos dispersivos.

A pesar de que el esquema, de la forma que se lo ha presentado, resulta inestable ante la mayoría de los problemas de interés, se considera provechoso como ejemplo de un método numérico cuya disipación es insuficiente para capturar correctamente las soluciones en el espacio de fases.

6.3. Esquemas de volúmenes finitos

El procedimiento básico para derivar los esquemas de volúmenes finitos es, en gran parte, el mismo que se empleó en la Sección 4.7. El objetivo es resolver la forma conservativa de la ecuación de Vlasov axialmente simétrica sobre un espacio de fases tridimensional (r, v_r, v_θ) :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r f) + \frac{\partial}{\partial v_r} \left(\left[a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right] f \right) + \frac{\partial}{\partial v_\theta} \left(\left[-\frac{v_r v_\theta}{r} \right] f \right) = 0 \tag{6.31}$$

La hipótesis de simetría axial implica que la función de distribución se asume independiente de la coordenada azimutal θ . Integrando la Ec. 6.31 sobre un diferencial de

volumen en el espacio de fases, se consigue la forma débil de la ley de conservación dada por ecuación de Vlasov axialmente simétrica:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} f(t, r, v_r, v_{\theta}) d\Omega + \oint_{\sigma} \mathbf{F}_{\mathbf{r}}(t, r, v_r, v_{\theta}, f) \cdot d\boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (6.32)$$

donde:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{r}} = \begin{bmatrix} v_r f \\ \left(a_r + \frac{v_{\theta}^2}{r}\right) f \\ \left(-\frac{v_r v_{\theta}}{r}\right) f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha(v_r) f \\ \beta(r, v_{\theta}) f \\ \gamma(r, v_r, v_{\theta}) f \end{bmatrix} \quad (6.33)$$

$$d\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} r d\theta dv_r dv_{\theta} \\ r dr d\theta dv_{\theta} \\ r dr d\theta dv_r \end{bmatrix} \quad (6.34)$$

La formulación débil es particularmente interesante en el marco de los métodos de volúmenes finitos, ya que expresa la variación temporal de la cantidad de partículas dentro de un volumen Ω como función de los flujos netos de la función de distribución integrados sobre la frontera de Ω .

Notar que, si bien sólo se tiene en cuenta la variación de f respecto de tres coordenadas (r, v_r, v_{θ}) , y el vector flujo tiene sólo tres componentes, el espacio de fases tiene en realidad cuatro dimensiones. La dimensión generada por la coordenada θ es fundamental para tomar en cuenta la variación de los elementos de volumen y de superficie con la coordenada radial r .

6.3.1. Discretización espacial

Si bien en la presente sección se describe detalladamente la discretización en volúmenes finitos de un espacio de fases de cuatro dimensiones, su extensión a seis dimensiones $(r, \theta, z, v_r, v_{\theta}, v_z)$ se hace de manera directa. Además, el procedimiento se extiende fácilmente para tener en cuenta variaciones a lo largo de la coordenada θ , y así modelar plasmas que no cumplen con la condición de simetría axial.

La porción de interés del espacio de fases, o dominio de cálculo, se descompone en volúmenes de control finitos usando una malla estructurada, uniforme y constante en el tiempo, siendo Δr , Δv_r y Δv_{θ} , la longitud de cada celda en las direcciones de r , v_r y v_{θ} , respectivamente. La longitud de una celda en la dirección azimutal θ no es uniforme en el espacio ya que depende de la coordenada radial, y es $r\Delta\theta$.

Se usará el índice i para identificar las celdas en la dirección radial, y los índices k, l para identificar las celdas en el plano de velocidades según las direcciones de v_r y v_{θ} , respectivamente. Se denota como $\Omega_{i,k,l}$ a la celda centrada en el punto $(r_i, v_{rk}, v_{\theta l})$, es

decir:

$$\begin{aligned} \Omega_{i,k,l} = & \left[r_i - \frac{\Delta r}{2}, r_i + \frac{\Delta r}{2} \right] \times [0, \Delta\theta] \\ & \times \left[v_{r_k} - \frac{\Delta v_r}{2}, v_{r_k} + \frac{\Delta v_r}{2} \right] \times \left[v_{\theta_l} - \frac{\Delta v_\theta}{2}, v_{\theta_l} + \frac{\Delta v_\theta}{2} \right] \end{aligned} \quad (6.35)$$

En las Figuras 6.1 y 6.2 se ilustra la discretización del dominio y se indica la nomenclatura usada para denotar las celdas. Como resulta muy difícil dibujar una celda en cuatro dimensiones, en la Fig. 6.1 se representa una celda, de cuatro dimensiones, en un sub-espacio tridimensional del espacio de fases en el cual se ha omitido la dimensión generada por la coordenada v_θ . Luego, en la Fig. 6.2, se representa la misma celda pero en otro sub-espacio tridimensional donde la dimensión generada por θ está oculta. Los flujos a lo largo de las tres direcciones representadas en esta última figura son los que se tienen en cuenta para evolucionar en el tiempo la función de distribución integrada sobre la celda.

Sea $f_{i,k,l}^n$ la aproximación numérica del valor de $f(t, r, v_r, v_\theta)$ integrado sobre el volumen de la celda $\Omega_{i,k,l}$, y en el instante de tiempo $t^n = n\Delta t$:

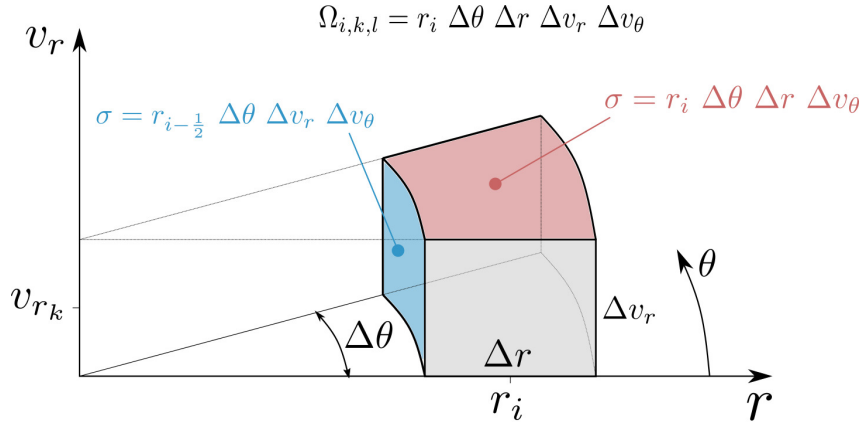
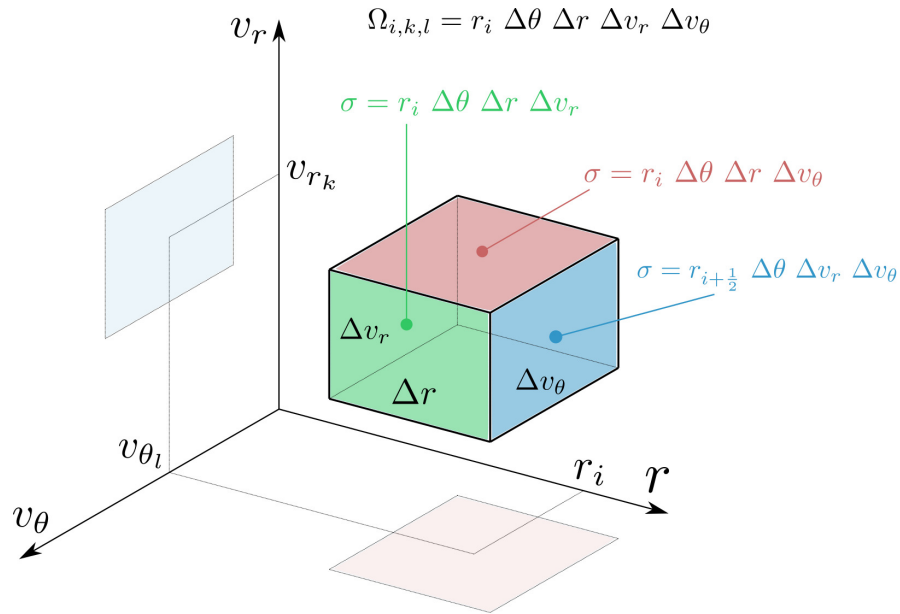
$$f_{i,k,l}^n = \int_0^{\Delta\theta} \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} \int_{v_{r_{k-\frac{1}{2}}}}^{v_{r_{k+\frac{1}{2}}}} \int_{v_{\theta_{l-\frac{1}{2}}}}^{v_{\theta_{l+\frac{1}{2}}}} f(t^n, r, v_r, v_\theta) r d\theta dr dv_r dv_\theta \quad (6.36)$$

donde se ha usado la notación:

$$\begin{aligned} r_{i\pm\frac{1}{2}} &= r_i \pm \frac{\Delta r}{2} \\ v_{r_{k\pm\frac{1}{2}}} &= v_{r_k} \pm \frac{\Delta v_r}{2} \\ v_{\theta_{l\pm\frac{1}{2}}} &= v_{\theta_l} \pm \frac{\Delta v_\theta}{2} \end{aligned}$$

Por conveniencia, se hace $\Delta\theta = 1 \text{ rad}$, de manera tal que la integración sobre θ puede ser omitida considerando que ni f ni las velocidades de advección dependen de θ . Esto es posible gracias a que, en este caso, el espaciamiento en la dirección azimutal es arbitrario, siempre y cuando sea distinto de cero ($\Delta\theta \neq 0$) para así tener en cuenta el hecho de que el elemento de volumen y los elementos de superficie escritos en coordenadas cilíndricas crecen con el radio (ver Figuras 6.1 y 6.2).

Notar la diferencia entre esta definición de los valores discretos de la función de distribución (Ec. 6.36), y la usada en coordenadas cartesianas (Ec. 4.102), donde trabajábamos con valores promediados sobre la celda en vez de integrados. La variable primaria, cuyo valor se quiere determinar en cada instante de tiempo, es ahora la integral de volumen de f sobre cada celda.

Figura 6.1: Celda genérica en el sub-espacio (r, θ, v_r) . Dimensión v_θ oculta.Figura 6.2: Celda genérica en el sub-espacio (r, v_r, v_θ) . Dimensión θ oculta.

Se definen los valores de f integrados sobre las caras de la celda, cuyas áreas diferenciales se encuentran definidas en la Ec. 6.34, como:

$$\langle f \rangle_{i \pm \frac{1}{2}, k, l} = \int_0^{\Delta \theta} \int_{v_{r, k - \frac{1}{2}}}^{v_{r, k + \frac{1}{2}}} \int_{v_{\theta, l - \frac{1}{2}}}^{v_{\theta, l + \frac{1}{2}}} f \left(r_{i \pm \frac{1}{2}}, v_r, v_\theta \right) r_{i \pm \frac{1}{2}} d\theta dv_r dv_\theta \quad (6.37)$$

$$\langle f \rangle_{i, k \pm \frac{1}{2}, l} = \int_0^{\Delta \theta} \int_{r_{i - \frac{1}{2}}}^{r_{i + \frac{1}{2}}} \int_{v_{\theta, l - \frac{1}{2}}}^{v_{\theta, l + \frac{1}{2}}} f \left(r, v_{r, k \pm \frac{1}{2}}, v_\theta \right) r d\theta dr dv_\theta \quad (6.38)$$

$$\langle f \rangle_{i, k, l \pm \frac{1}{2}} = \int_0^{\Delta \theta} \int_{r_{i - \frac{1}{2}}}^{r_{i + \frac{1}{2}}} \int_{v_{r, k - \frac{1}{2}}}^{v_{r, k + \frac{1}{2}}} f \left(r, v_r, v_{\theta, l \pm \frac{1}{2}} \right) r d\theta dr dv_r \quad (6.39)$$

Las integrales de la función de distribución sobre las caras normales a la dirección azimutal θ no son usadas en la aproximación axialmente simétrica, por lo cual no se incluye aquí

su expresión.

Integrando la ecuación de Vlasov (Ec. 6.31) sobre el volumen de la celda $\Omega_{i,k,l}$, se obtiene la ecuación para la evolución temporal de la variable primaria, la cual dice que la variación en el tiempo de f integrada sobre el volumen de la celda es igual al flujo neto de f integrado sobre sus caras. Esto es:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{i,k,l}^n = & - \left(\langle F \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} - \langle F \rangle_{i-\frac{1}{2},k,l} \right) \\ & - \left(\langle F \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} - \langle F \rangle_{i,k-\frac{1}{2},l} \right) - \left(\langle F \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} - \langle F \rangle_{i,k,l-\frac{1}{2}} \right) \end{aligned} \quad (6.40)$$

donde los corchetes $\langle F \rangle$ denotan cantidades integradas sobre las superficies rectangulares y ortogonales que forman las caras de la celda (ver Fig. 6.2).

En la Ec. 6.33 se introdujo la notación αf , βf , γf para hacer referencia a las componentes del flujo \mathbf{F}_r , donde α , β y γ representan las velocidades de advección en las direcciones de r , v_r y v_θ , respectivamente. Usando esta notación, los flujos integrados sobre las caras de la celda se escriben:

$$\langle F \rangle_{i\pm\frac{1}{2},k,l} = \int_{v_{r,k-\frac{1}{2}}}^{v_{r,k+\frac{1}{2}}} \int_{v_{\theta,l-\frac{1}{2}}}^{v_{\theta,l+\frac{1}{2}}} \alpha(v_r) f\left(r_{i\pm\frac{1}{2}}, v_r, v_\theta\right) r_{i\pm\frac{1}{2}} dv_r dv_\theta \quad (6.41)$$

$$\langle F \rangle_{i,k\pm\frac{1}{2},l} = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} \int_{v_{\theta,l-\frac{1}{2}}}^{v_{\theta,l+\frac{1}{2}}} \beta(r, v_\theta) f\left(r, v_{r,k\pm\frac{1}{2}}, v_\theta\right) r dr dv_\theta \quad (6.42)$$

$$\langle F \rangle_{i,k,l\pm\frac{1}{2}} = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} \int_{v_{r,k-\frac{1}{2}}}^{v_{r,k+\frac{1}{2}}} \gamma\left(r, v_r, v_{\theta,l\pm\frac{1}{2}}\right) f\left(r, v_r, v_{\theta,l\pm\frac{1}{2}}\right) r dr dv_r \quad (6.43)$$

Por simplicidad, en las expresiones anteriores se ha obviado la integración en θ , así como tampoco se han incluido los flujos en la dirección azimutal por ser nulos. Si se comparan los flujos en coordenadas cilíndricas con aquellos obtenidos para el sistema cartesiano (Ecs. 4.104 y 4.105), una de las diferencias que se aprecian es que, en coordenadas cilíndricas, la integración sobre las caras de la celda requiere tener en cuenta la variación de la superficie con el radio.

La componente del flujo en cada dirección es el producto de la función de distribución por la velocidad de advección en esa dirección. De la misma forma que en el Capítulo 4, para computar los flujos integrados sobre las caras de las celdas, será necesario aproximar la integral del producto entre dos y tres cantidades, y aproximar también, valores integrados sobre las caras a partir de valores integrados sobre el volumen de las celdas. Lo primero se lleva a cabo usando las relaciones entre valores puntuales e integrales de superficie derivadas a partir de la expansión en series de Taylor de las cantidades en cuestión, mientras que para lo segundo, se hace una interpolación polinómica de las integrales de volumen.

6.3.2. Aproximación de la integral del producto entre varias cantidades

En la Sección 4.7.2 vimos cómo realizar las integrales de superficie con precisión de cuarto orden cuando las componentes del flujo se componen del producto entre dos cantidades. Ahora, supongamos que el flujo F sobre la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$ normal a la dirección de r en $r = r_{i+\frac{1}{2}}$ se compone del producto entre tres cantidades f , g y h . Sean $f_{i+\frac{1}{2},k,l}$, $g_{i+\frac{1}{2},k,l}$ y $h_{i+\frac{1}{2},k,l}$ los valores puntuales de dichas cantidades en el centro de la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$.

Expandiendo las funciones f , g y h en series de Taylor alrededor del centro e integrando sobre la cara, se obtienen relaciones completamente análogas a las conseguidas anteriormente:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} &= \int_{\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}} f r d\theta dv_r dv_\theta \\ &= \left[f_{i+\frac{1}{2},k,l} + \frac{1}{24} \Delta v_r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial v_r^2} + \frac{1}{24} \Delta v_\theta^2 \frac{\partial^2 f}{\partial v_\theta^2} + \mathcal{O}(\Delta v^4) \right] r_{i+\frac{1}{2}} \Delta v_r \Delta v_\theta \end{aligned} \quad (6.44)$$

$$\begin{aligned} \langle fgh \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} &= \int_{\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}} fgh r d\theta dv_r dv_\theta \\ &= \left[f_{i+\frac{1}{2},k,l} g_{i+\frac{1}{2},k,l} h_{i+\frac{1}{2},k,l} + \frac{1}{24} \Delta v_r^2 \frac{\partial^2 (fgh)}{\partial v_r^2} + \frac{1}{24} \Delta v_\theta^2 \frac{\partial^2 (fgh)}{\partial v_\theta^2} \right] r_{i+\frac{1}{2}} \Delta v_r \Delta v_\theta \end{aligned} \quad (6.45)$$

Recordar que las integrales de superficie deben hacerse también a lo largo de la coordenada θ para no pasar por alto la variación de la superficie con el radio. La ecuación 6.44 da la relación entre un valor integrado sobre la cara y su valor puntual en el centro para una cantidad simple, mientras que la Ec. 6.45 provee esta misma relación para el producto de tres funciones.

6.3.3. Interpolación polinómica unidimensional

Previamente a calcular los flujos, es necesaria una interpolación de las variables asociadas con cada componente de \mathbf{F}_r para obtener los valores integrados sobre la superficie de las caras a partir de los valores integrados sobre el volumen de las celdas. En particular, se requiere aproximar $\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l}$, $\langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l}$ y $\langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}}$ a partir de la variable primaria $f_{i,k,l}^n$. Para esta tarea, se usa nuevamente una reconstrucción polinómica P_d de grado d de la forma:

$$P_d(r) = p_d r^d + \dots + p_2 r^2 + p_1 r + p_0 \quad (6.46)$$

Se describirá en primer lugar el procedimiento para interpolar el valor de $\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l}$, es decir, el valor integrado de f sobre la superficie normal a la dirección radial. Determinar los $d + 1$ coeficientes p_i requiere evaluar $d + 1$ condiciones de interpolación obtenidas a

partir de la definición de $d + 1$ valores integrales sobre las celdas cercanas a la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$. Si la reconstrucción se realiza con un polinomio de tercer grado $P_3(r)$, y se usa el stencil centrado (CD4) dado por las celdas:

$$\{i - 1, i, i + 1, i + 2\} \tag{6.47}$$

entonces, las 4 condiciones de interpolación son:

$$f_{i-1,k,l} = \int_{r_{i-\frac{3}{2}}}^{r_{i-\frac{1}{2}}} P_3(r) r dr \tag{6.48}$$

$$f_{i,k,l} = \int_{r_{i-\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{1}{2}}} P_3(r) r dr \tag{6.49}$$

$$f_{i+1,k,l} = \int_{r_{i+\frac{1}{2}}}^{r_{i+\frac{3}{2}}} P_3(r) r dr \tag{6.50}$$

$$f_{i+2,k,l} = \int_{r_{i+\frac{3}{2}}}^{r_{i+\frac{5}{2}}} P_3(r) r dr \tag{6.51}$$

Hacer las integrales definidas en las ecuaciones 6.48 - 6.51 da como resultado un sistema de 4 ecuaciones lineales cuyas incógnitas son los coeficientes p_i del polinomio interpolante. Resolviendo este sistema y evaluando el polinomio $P_3(r)$ en $r = r_{i+\frac{1}{2}}$ se obtiene la aproximación buscada para el valor de f integrado sobre la cara con una precisión de cuarto orden:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} = \frac{1}{12\Delta r (5\lambda^4 - 15\lambda^2 + 4)} & \left[\begin{aligned} & (-5\lambda^3 \quad -8\lambda^2 \quad +3\lambda \quad +4) \langle f \rangle_{i-1,k,l} \\ & + (35\lambda^3 \quad +24\lambda^2 \quad -93\lambda \quad -60) \langle f \rangle_{i,k,l} \\ & + (35\lambda^3 \quad -24\lambda^2 \quad -93\lambda \quad +60) \langle f \rangle_{i+1,k,l} \\ & + (-5\lambda^3 \quad +8\lambda^2 \quad +3\lambda \quad -4) \langle f \rangle_{i+2,k,l} \end{aligned} \right] \end{aligned} \tag{6.52}$$

donde la variable adimensional λ se define como:

$$\lambda = \frac{r_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta r} \tag{6.53}$$

Notar en la Ec. 6.52, que los coeficientes que multiplican a los valores integrados sobre el volumen de la celda son funciones de la posición radial de la cara $r_{i+\frac{1}{2}}$ (a través de λ), y no constantes como era en coordenadas cartesianas.

Para interpolar los valores integrales de f sobre las caras $\sigma_{i,k+\frac{1}{2},l}$ y $\sigma_{i,k,l+\frac{1}{2}}$, el procedimiento es el mismo y las aproximaciones que se obtienen son las mismas que en coordenadas cartesianas, ya que los volúmenes de las celdas sólo dependen de r y no de las demás variables. Es esta la razón por la cual la reconstrucción a lo largo de la coordenada radial es diferente de las demás direcciones. Luego, la aproximación de cuarto orden

para $\langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l}$ obtenida usando el stencil centrado:

$$\{k-1, k, k+1, k+2\} \quad (6.54)$$

es:

$$\langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} = \frac{1}{\Delta v_r} \left[\frac{7}{12} (f_{i,k,l} + f_{i,k+1,l}) - \frac{1}{12} (f_{i,k-1,l} + f_{i,k+2,l}) \right] \quad (6.55)$$

Notar la similitud de la Ec. 6.55 con la obtenida en coordenadas cartesianas (Ec. 4.113). La reconstrucción centrada de cuarto orden para $\langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}}$ es completamente análoga a la anterior.

En el Capítulo 5, se realizaron numerosas pruebas numéricas en coordenadas cartesianas que indicaron que las reconstrucciones centradas en los esquemas de volúmenes finitos tienen disipación insuficiente como para capturar correctamente la solución en un espacio de fases muy filamentado. Las reconstrucciones CD4 y CD2 daban lugar rápidamente a oscilaciones no físicas y a la aparición de valores negativos de la función de distribución, lo cual no ocurría de forma tan evidente con las reconstrucciones de tipo upwind UP3 y UP5. Por este motivo, se considera ventajoso emplear reconstrucciones upwind a pesar de tener la desventaja de que el stencil necesario para cada cara depende del signo de la velocidad local de advección.

Ahora, la reconstrucción para aproximar la integral de f en la dirección radial sobre la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$ se realiza con un polinomio de segundo grado $P_2(r)$, y se usa el stencil upwind (UP3) dado por las celdas:

$$\{i-1, i, i+1\}, \quad \text{si } \alpha(v_r) > 0 \quad (6.56)$$

$$\{i, i+1, i+2\}, \quad \text{si } \alpha(v_r) < 0 \quad (6.57)$$

Si la velocidad local de advección $\alpha(v_r)$ es positiva, entonces se usan los valores integrados sobre dos celdas a la izquierda de la cara y una a la derecha. Por el contrario, cuando $\alpha(v_r)$ es negativa, son usados los valores integrados sobre dos celdas a la derecha y una a la izquierda. Esta diferencia es lo que le da su carácter upwind a esta reconstrucción.

Luego, integrando las cuatro condiciones de interpolación y resolviendo el sistema de ecuaciones lineales para determinar los coeficientes del polinomio, se obtiene:

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} = \frac{1}{6\Delta r (-2\lambda^3 + 3\lambda^2 + \lambda - 1)} \left[\begin{aligned} & \left(\begin{array}{ccc} 2\lambda^2 & +0\lambda & -1 \end{array} \right) \langle f \rangle_{i-1,k,l} \\ & + \left(\begin{array}{ccc} -10\lambda^2 & +9\lambda & +11 \end{array} \right) \langle f \rangle_{i,k,l} \\ & + \left(\begin{array}{ccc} -4\lambda^2 & +9\lambda & -4 \end{array} \right) \langle f \rangle_{i+1,k,l} \end{aligned} \right] \quad (6.58)$$

en el caso con $\alpha(v_r) > 0$, y:

$$\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} = \frac{1}{-6\Delta r(-2\lambda^3 - 3\lambda^2 + \lambda + 1)} \left[\begin{aligned} & (4\lambda^2 + 9\lambda + 4) \langle f \rangle_{i,k,l} \\ & + (10\lambda^2 + 9\lambda - 11) \langle f \rangle_{i+1,k,l} \\ & + (-2\lambda^2 + 0\lambda + 1) \langle f \rangle_{i+2,k,l} \end{aligned} \right] \quad (6.59)$$

si $\alpha(v_r) < 0$. Las expresiones para la reconstrucción UP3 en las demás direcciones son análogas a las escritas en coordenadas cartesianas (Ecs. 4.115 y 4.116).

Para conseguir una reconstrucción upwind de quinto orden (UP5), se emplea un polinomio de orden cuatro $P_4(r)$ sobre el stencil:

$$\{i - 2, i - 1, i, i + 1, i + 2\}, \quad \text{si } \alpha(v_r) > 0 \quad (6.60)$$

$$\{i - 1, i, i + 1, i + 2, i + 3\}, \quad \text{si } \alpha(v_r) < 0 \quad (6.61)$$

Se tienen, para cada signo de la velocidad de advección, cinco condiciones de interpolación que conducen a un sistema de cinco ecuaciones lineales con cinco incógnitas: los coeficientes de $P_4(r)$. La aproximación obtenida en este caso para la integral de f sobre la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$ no se incluye aquí pero puede verse en (Vogman et al., 2018).

6.3.4. Cálculo de los flujos

Una vez conocidos los valores de la función de distribución integrados sobre las caras, a partir de los valores integrados sobre el volumen de las celdas, es posible calcular la integral sobre las caras del producto de las velocidades de advección por f haciendo uso de las Ecs. 6.44 y 6.45.

En primer lugar, se determina el valor de f en el centro de cada cara en función de los valores integrados sobre las caras por medio de la relación 6.45. Para la cara normal a la dirección radial ($\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$), el valor puntual es:

$$f_{i+\frac{1}{2},k,l} = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{1}{\Delta v_r \Delta v_\theta} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} - \frac{1}{24} \Delta v_r^2 \left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial v_r^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{24} \Delta v_\theta^2 \left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial v_\theta^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} \right) \quad (6.62)$$

Donde el factor r surge del hecho de que las integrales de volumen y de superficie contienen al Jacobiano r . Las derivadas segundas transversales a la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$ se aproximan mediante fórmulas de diferencias finitas centradas de segundo orden a partir de los valores integrados sobre las caras, esto es:

$$\left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial v_r^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{1}{\Delta v_r \Delta v_\theta} \frac{1}{\Delta v_r^2} \left[\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k-1,l} - 2 \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k+1,l} \right] \quad (6.63)$$

$$\left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial v_\theta^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{1}{\Delta v_r \Delta v_\theta} \frac{1}{\Delta v_\theta^2} \left[\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l-1} - 2 \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l+1} \right] \quad (6.64)$$

Sustituyendo las ecuaciones 6.63 y 6.64 en la 6.62 se consigue la expresión para calcular el valor puntual de f en el centro de la cara $\sigma_{i+\frac{1}{2},k,l}$:

$$f_{i+\frac{1}{2},k,l} = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}} \Delta v_r \Delta v_\theta} \left[\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} - \frac{1}{24} \left(\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k-1,l} - 2 \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k+1,l} \right) - \frac{1}{24} \left(\langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l-1} - 2 \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l+1} \right) \right] \quad (6.65)$$

Luego, el valor integrado del flujo $\langle F \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} = \langle \alpha f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l}$, definido según la Ec. 6.40, se evalúa empleando la Ec. 6.45:

$$\langle \alpha f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} = r_{i+\frac{1}{2}} \left(\alpha_{i+\frac{1}{2},k,l} f_{i+\frac{1}{2},k,l} + \frac{1}{24} \Delta v_r^2 \left[\frac{\partial^2 (\alpha f)}{\partial v_r^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{24} \Delta v_\theta^2 \left[\frac{\partial^2 (\alpha f)}{\partial v_\theta^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} \right) \quad (6.66)$$

Donde las derivadas segundas transversales se aproximan por diferencias finitas centradas de segundo orden, al igual que se hizo anteriormente, usando los valores integrados sobre las caras ya determinados por interpolación, es decir:

$$\left[\frac{\partial^2 (\alpha f)}{\partial v_r^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}} \Delta v_r \Delta v_\theta} \frac{1}{\Delta v_r^2} \cdot \left(\alpha_{i+\frac{1}{2},k-1,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k-1,l} - 2 \alpha_{i+\frac{1}{2},k,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \alpha_{i+\frac{1}{2},k+1,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k+1,l} \right) \quad (6.67)$$

$$\left[\frac{\partial^2 (\alpha f)}{\partial v_\theta^2} \right]_{r_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}} \Delta v_r \Delta v_\theta} \frac{1}{\Delta v_\theta^2} \cdot \left(\alpha_{i+\frac{1}{2},k,l-1} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l-1} - 2 \alpha_{i+\frac{1}{2},k,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \alpha_{i+\frac{1}{2},k,l+1} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l+1} \right) \quad (6.68)$$

Si se reemplazan las expresiones para las derivadas transversales (Ecs. 6.67 y 6.68) en la Ec. 6.66, resulta la expresión completa para la componente del flujo en la dirección radial:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} &= r_{i+\frac{1}{2}} \alpha_{i+\frac{1}{2},k,l} f_{i+\frac{1}{2},k,l} \Delta v_r \Delta v_\theta \\ &+ \frac{1}{24} \left(\alpha_{i+\frac{1}{2},k-1,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k-1,l} - 2 \alpha_{i+\frac{1}{2},k,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \alpha_{i+\frac{1}{2},k+1,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k+1,l} \right) \\ &+ \frac{1}{24} \left(\alpha_{i+\frac{1}{2},k,l-1} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l-1} - 2 \alpha_{i+\frac{1}{2},k,l} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + \alpha_{i+\frac{1}{2},k,l+1} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l+1} \right) \end{aligned} \quad (6.69)$$

Esta expresión se simplifica un poco si recordamos que $\alpha = v_r$, con lo cual:

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} &= r_{i+\frac{1}{2}} v_{r_k} f_{i+\frac{1}{2},k,l} \Delta v_r \Delta v_\theta \\ &+ \frac{1}{24} \left(v_{r_k} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k-1,l} - 2v_{r_k} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + v_{r_k} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k+1,l} \right) \\ &+ \frac{1}{24} \left(v_{r_k} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l-1} - 2v_{r_k} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l} + v_{r_k} \langle f \rangle_{i+\frac{1}{2},k,l+1} \right) \end{aligned} \quad (6.70)$$

El mismo procedimiento que ha sido usado hasta el momento para aproximar valores puntuales y flujos sobre la cara normal a la dirección radial puede ser usado en las otras dos direcciones por medio de las Ecs. 6.44 y 6.45. Los valores puntuales de f en los centros de las caras $\sigma_{i,k+\frac{1}{2},l}$ y $\sigma_{i,k,l+\frac{1}{2}}$ son, respectivamente:

$$\begin{aligned} f_{i,k+\frac{1}{2},l} &= \frac{1}{r_i} \left(\frac{1}{\Delta r \Delta v_\theta} \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} - \frac{1}{24} \Delta r^2 \left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial r^2} \right]_{v_{r_{k+\frac{1}{2}}}} - \frac{1}{24} \Delta v_\theta^2 \left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial v_\theta^2} \right]_{v_{r_{k+\frac{1}{2}}}} \right) \\ &= \frac{1}{r_i \Delta r \Delta v_\theta} \left[\langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} - \frac{1}{24} \left(\langle f \rangle_{i-1,k+\frac{1}{2},l} - 2 \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} + \langle f \rangle_{i+1,k+\frac{1}{2},l} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{24} \left(\langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l-1} - 2 \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} + \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l+1} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.71)$$

$$\begin{aligned} f_{i,k,l+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{r_i} \left(\frac{1}{\Delta r \Delta v_r} \langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} - \frac{1}{24} \Delta r^2 \left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial r^2} \right]_{v_{\theta_{l+\frac{1}{2}}}} - \frac{1}{24} \Delta v_r^2 \left[\frac{\partial^2 (rf)}{\partial v_r^2} \right]_{v_{\theta_{l+\frac{1}{2}}}} \right) \\ &= \frac{1}{r_i \Delta r \Delta v_r} \left[\langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} - \frac{1}{24} \left(\langle f \rangle_{i-1,k,l+\frac{1}{2}} - 2 \langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} + \langle f \rangle_{i+1,k,l+\frac{1}{2}} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{24} \left(\langle f \rangle_{i,k-1,l+\frac{1}{2}} - 2 \langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} + \langle f \rangle_{i,k+1,l+\frac{1}{2}} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.72)$$

Finalmente, pueden calcularse los flujos integrados sobre las caras en la dirección de v_r : $\langle F \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} = \langle \beta f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l}$, y en la dirección de v_θ : $\langle F \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} = \langle \gamma f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}}$, de la siguiente manera:

$$\langle \beta f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} = r_i \left(\beta_{i,k+\frac{1}{2},l} f_{i,k+\frac{1}{2},l} + \frac{1}{24} \Delta r^2 \left[\frac{\partial^2 (\beta f)}{\partial r^2} \right]_{v_{r_{k+\frac{1}{2}}}} + \frac{1}{24} \Delta v_\theta^2 \left[\frac{\partial^2 (\beta f)}{\partial v_\theta^2} \right]_{v_{r_{k+\frac{1}{2}}}} \right) \quad (6.73)$$

$$\langle \gamma f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} = r_i \left(\gamma_{i,k,l+\frac{1}{2}} f_{i,k,l+\frac{1}{2}} + \frac{1}{24} \Delta r^2 \left[\frac{\partial^2 (\gamma f)}{\partial r^2} \right]_{v_{\theta_{l+\frac{1}{2}}}} + \frac{1}{24} \Delta v_r^2 \left[\frac{\partial^2 (\gamma f)}{\partial v_r^2} \right]_{v_{\theta_{l+\frac{1}{2}}}} \right) \quad (6.74)$$

$$\begin{aligned}
\langle F \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} &= r_i \beta_{i,k+\frac{1}{2},l} f_{i,k+\frac{1}{2},l} \Delta r \Delta v_\theta \\
&+ \frac{1}{24} \left(\beta_{i-1,k+\frac{1}{2},l} \langle f \rangle_{i-1,k+\frac{1}{2},l} - 2\beta_{i,k+\frac{1}{2},l} \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} + \beta_{i+1,k+\frac{1}{2},l} \langle f \rangle_{i+1,k+\frac{1}{2},l} \right) \\
&+ \frac{1}{24} \left(\beta_{i,k+\frac{1}{2},l-1} \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l-1} - 2\beta_{i,k+\frac{1}{2},l} \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l} + \beta_{i,k+\frac{1}{2},l+1} \langle f \rangle_{i,k+\frac{1}{2},l+1} \right)
\end{aligned} \tag{6.75}$$

$$\begin{aligned}
\langle F \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} &= r_i \gamma_{i,k,l+\frac{1}{2}} f_{i,k,l+\frac{1}{2}} \Delta r \Delta v_r \\
&+ \frac{1}{24} \left(\gamma_{i-1,k,l+\frac{1}{2}} \langle f \rangle_{i-1,k,l+\frac{1}{2}} - 2\gamma_{i,k,l+\frac{1}{2}} \langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} + \gamma_{i+1,k,l+\frac{1}{2}} \langle f \rangle_{i+1,k,l+\frac{1}{2}} \right) \\
&+ \frac{1}{24} \left(\gamma_{i,k-1,l+\frac{1}{2}} \langle f \rangle_{i,k-1,l+\frac{1}{2}} - 2\gamma_{i,k,l+\frac{1}{2}} \langle f \rangle_{i,k,l+\frac{1}{2}} + \gamma_{i,k+1,l+\frac{1}{2}} \langle f \rangle_{i,k+1,l+\frac{1}{2}} \right)
\end{aligned} \tag{6.76}$$

Donde las velocidades de advección β y γ discretas son:

$$\begin{aligned}
\beta_{i,k,l} &= \beta(r_i, v_{\theta_l}) \\
&= a_{r_i} + \frac{v_{\theta_l}^2}{r_i}
\end{aligned} \tag{6.77}$$

$$\begin{aligned}
\gamma_{i,k,l} &= \gamma(r_i, v_{r_k}, v_{\theta_l}) \\
&= -\frac{v_{r_k} v_{\theta_l}}{r_i}
\end{aligned} \tag{6.78}$$

Capítulo 7

Pruebas numéricas en coordenadas cilíndricas

La importancia de modelar correctamente plasmas axialmente simétricos, y de desarrollar métodos numéricos para las ecuaciones cinéticas escritas en coordenadas cilíndricas, reside en los variados problemas de aplicación práctica que pueden simularse empleando estos métodos. Como ejemplos de estas aplicaciones, se mencionan las sondas de Langmuir cilíndricas, las amarras espaciales electrodinámicas, los dispositivos de confinamiento z -*pinch* y los propulsores iónicos de efecto Hall. Si no se explotara la simetría axial intrínseca de estos problemas, sería necesario modelar y simular espacios de fases de 5 y 6 dimensiones, lo cual no es posible actualmente desde el punto de vista del costo computacional. Si bien se espera que esta restricción sea cada vez menos prohibitiva, el uso de espacios de dimensión reducida permite aumentar la resolución y complejidad de la discretización.

Históricamente, el estudio numérico del modelo cinético de plasmas sobre dominios axialmente simétricos se ha llevado a cabo casi siempre con métodos de tipo PIC, y existen escasos trabajos sobre métodos Eulerianos para la resolución de la ecuación de Vlasov en coordenadas cilíndricas. Shoucri et al. (Shoucri et al., 2004) estudiaron la separación de cargas en la frontera de un plasma resolviendo la ecuación de Vlasov cilíndrica mediante un esquema semi-Lagrangiano con splitting temporal. Filbet et al. (Filbet et al., 2002) aplicaron el método semi-Lagrangiano a la ecuación de Vlasov axialmente simétrica pero sobre un espacio de fases bidimensional, gracias a que independizaron las ecuaciones respecto de la coordenada v_θ usando la conservación de la cantidad de movimiento angular. Sánchez-Arriaga (Sánchez-Arriaga, 2013) estudió la recolección de corriente por parte de una sonda de Langmuir cilíndrica usando un esquema Euleriano basado en diferencias finitas. Finalmente, Vogman et al. (Vogman et al., 2018) fueron los primeros en resolver la ecuación de Vlasov en coordenadas cilíndricas mediante una discretización de volúmenes finitos.

Con el propósito de evaluar y comparar los métodos numéricos presentados en el

capítulo anterior para la resolución del sistema Vlasov-Poisson tridimensional (r, v_r, v_θ) escrito en coordenadas cilíndricas, se simularán dos problemas de prueba. El primero consiste en un estado inicial de equilibrio termodinámico sin campos electromagnéticos y se evalúa la capacidad del esquema para mantener en el tiempo este estado de equilibrio. El segundo es el estudio de las propiedades del plasma en las inmediaciones de una sonda cilíndrica cuyo potencial es cambiado abruptamente.

7.1. Preservación de una función de distribución en equilibrio

Si se observa la ecuación de Vlasov escrita respecto de un sistema de coordenadas cartesianas (Ec. 3.18):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v_x \frac{\partial f}{\partial x} - v_y \frac{\partial f}{\partial y} - v_z \frac{\partial f}{\partial z} - a_x \frac{\partial f}{\partial v_x} - a_y \frac{\partial f}{\partial v_y} - a_z \frac{\partial f}{\partial v_z}$$

se aprecia que si f es una función de distribución inicialmente uniforme en el espacio físico (x, y, z) , y no existen campos electromagnéticos ($\mathbf{a} = \mathbf{0}$), entonces todos los términos del lado derecho son idénticamente nulos y la ecuación se reduce a:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

indicando que f nunca se desvía de su condición inicial f_0 . Notar que esto es cierto cualquiera sea la distribución de f en el espacio de velocidades, pudiendo ser una distribución muy apartada del equilibrio termodinámico, en tanto sea uniforme en el espacio.

En contraste, la ecuación de Vlasov definida sobre un espacio de fases en coordenadas cilíndricas tiene términos advectivos no nulos debidos a las aceleraciones centrífuga y de Coriolis, aún en ausencia de campos electromagnéticos y con la función de distribución espacialmente uniforme. Recordemos la forma advectiva en coordenadas cilíndricas (Ec. 3.29):

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -v_r \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - v_z \frac{\partial f}{\partial z} - \left(a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_r} - \left(a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \right) \frac{\partial f}{\partial v_\theta} - a_z \frac{\partial f}{\partial v_z}$$

y la reescribimos convenientemente como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & -v_r \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} - v_z \frac{\partial f}{\partial z} - a_r \frac{\partial f}{\partial v_r} - a_\theta \frac{\partial f}{\partial v_\theta} - a_z \frac{\partial f}{\partial v_z} \\ & - \frac{v_\theta}{r} \left(v_\theta \frac{\partial f}{\partial v_r} - v_r \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \right) \end{aligned} \quad (7.1)$$

Si la función de distribución inicial f_0 es uniforme en el espacio físico (r, θ, z) y no hay campos electromagnéticos aplicados externamente, la Ec. 7.1 queda:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{v_\theta}{r} \left(v_\theta \frac{\partial f_0}{\partial v_r} - v_r \frac{\partial f_0}{\partial v_\theta} \right) \quad (7.2)$$

Es decir, que las dos condiciones anteriores no son suficientes para garantizar la permanencia en el tiempo del estado inicial, como sí ocurría en coordenadas cartesianas. Si, además, f_0 es una distribución de equilibrio termodinámico de Maxwell-Boltzmann, la cual para dos dimensiones del espacio de velocidades (v_r, v_θ) es:

$$f_0(v_r, v_\theta) = n_0 \frac{m}{2\pi k_B T} \exp \left[-\frac{m}{2k_B T} (v_r^2 + v_\theta^2) \right] \quad (7.3)$$

entonces, derivando f_0 ,

$$\frac{\partial f_0}{\partial v_r} = -\frac{v_r}{v_{th}^2} f_0 \quad (7.4)$$

$$\frac{\partial f_0}{\partial v_\theta} = -\frac{v_\theta}{v_{th}^2} f_0 \quad (7.5)$$

se verifica que los términos correspondientes a la aceleración centrífuga y de Coriolis en la Ec. 7.2 se cancelan mutuamente dando lugar a la preservación del estado inicial.

El problema surge cuando la Ec. 7.1 se resuelve numéricamente. Si bien los términos del lado derecho de la Ec. 7.2 se cancelan analíticamente de forma exacta, no lo hacen necesariamente a nivel discreto, originando desviaciones de la condición inicial. El objetivo de esta sección es cuantificar y comparar la magnitud de estas desviaciones, y su evolución en el tiempo, para los distintos métodos numéricos presentados en el capítulo anterior.

El problema se complica un poco más cuando se resuelve la forma conservativa de la ecuación de Vlasov:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} = & -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r f) - \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{v_\theta}{r} f \right) - \frac{\partial}{\partial z} (v_z f) \\ & - \frac{\partial}{\partial v_r} \left(\left[a_r + \frac{v_\theta^2}{r} \right] f \right) - \frac{\partial}{\partial v_\theta} \left(\left[a_\theta - \frac{v_r v_\theta}{r} \right] f \right) - \frac{\partial}{\partial v_z} (a_z f) \end{aligned}$$

la cual, para una condición inicial espacialmente uniforme y en ausencia de campos electromagnéticos, se reduce a:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r f_0) - \frac{\partial}{\partial v_r} \left(\frac{v_\theta^2}{r} f_0 \right) - \frac{\partial}{\partial v_\theta} \left(-\frac{v_r v_\theta}{r} f_0 \right) \quad (7.6)$$

En este caso, para que se cumpla $\partial f / \partial t = 0$, son tres los términos que deben cancelarse mutuamente a nivel discreto, a pesar de que analíticamente se encuentra que estos se

contrarrestan de manera exacta. Introduciendo la función 7.3 en la Ec. 7.6 y haciendo las derivadas:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r f_0) = \frac{v_r}{r} f_0 \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial v_r} \left(\frac{v_\theta^2}{r} f_0 \right) = -\frac{v_\theta^2}{r} \frac{v_r}{v_{th}^2} f_0 \quad (7.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial v_\theta} \left(-\frac{v_r v_\theta}{r} f_0 \right) = -\frac{v_r}{r} f_0 + \frac{v_r v_\theta}{r} \frac{v_\theta}{v_{th}^2} f_0 \quad (7.9)$$

resultan tres expresiones cuya suma es nula.

En la práctica, ningún esquema en coordenadas cilíndricas puede mantener en el tiempo una función de distribución uniforme y en equilibrio termodinámico a causa de los errores numéricos, por más precisa que sea la discretización. Se puede argumentar que ningún método Euleriano desarrollado para la cinética de plasmas está destinado a la simulación de un plasma uniforme y en equilibrio, sino que buscan estudiar transitorios, comportamientos dinámicos e inestabilidades. Sin embargo, la capacidad del esquema para evolucionar correctamente un estado estacionario da una idea de la calidad y del orden de la discretización.

Esta prueba tiene como condición inicial para f_e , una función de distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann (ver Ec. 7.3) uniforme en todo el espacio físico delimitado por $r \in [r_0, r_{max}]$ donde $r_0 = 1 \lambda_{De}$ y $r_{max} = 4 \lambda_{De}$. La función de distribución para los iones, por su parte, se asume uniforme y estacionaria. Por comodidad, los límites del espacio de velocidades se adoptan iguales en la dirección de v_r y de v_θ . Esto es $v_r, v_\theta \in [-v_{max}, v_{max}]$ siendo $v_{max} = 8 v_{th}$. Todas las condiciones de borde consisten en una función de distribución prescripta, de Maxwell en la dirección radial, y nula en los extremos del espacio de velocidades:

$$f(t, r_0, v_r, v_\theta) = f_0(v_r, v_\theta) \quad (7.10)$$

$$f(t, r_{max}, v_r, v_\theta) = f_0(v_r, v_\theta) \quad (7.11)$$

$$f(t, r, \pm v_{max}, v_\theta) = 0 \quad (7.12)$$

$$f(t, r, v_r, \pm v_{max}) = 0 \quad (7.13)$$

La resolución de la grilla numérica está dada por el número de celdas en la dirección radial: $N_r = 100$, y en las direcciones de velocidad: $N_{v_r} = N_{v_\theta} = 100$. En muchos de los problemas que se estudian, se observa que la función de distribución presenta cierta simetría en su comportamiento respecto de las variables de velocidad, es por esto que se adoptan los mismos límites y la misma resolución tanto para v_r como para v_θ . El paso de tiempo usado es $\Delta t = 1,0E - 03 \ 1/\omega_{pe}$ y la duración de la prueba es de 5000 pasos de tiempo, equivalentes a $5 \ 1/\omega_{pe}$.

En la figura 7.1 se muestra la variación de la densidad de electrones en función del radio en varios instantes de tiempo (izquierda), junto con la evolución espacio temporal de ΔN_e (derecha), para los distintos esquemas presentados en el Capítulo 6. Desde el comienzo de la simulación, los errores numéricos causan que los dos términos del lado derecho de la Ec. 7.2 no se cancelen entre sí perturbando el equilibrio inicial de la función de distribución y dando lugar a variaciones espaciales de la densidad de partículas. Estas variaciones aparecen cerca de los extremos del dominio físico r_0 y r_{max} , y se propagan luego hacia el interior, siendo mucho más pronunciadas en la proximidad del límite interno debido que las velocidades de advección son inversamente proporcionales al radio (ver Ec. 7.2).

Se observa que estas variaciones tienen un comportamiento oscilatorio en el espacio, y su amplitud crece rápidamente en el tiempo, hasta que la disipación intrínseca de la discretización frena su crecimiento. Las variaciones de la densidad de electrones generan densidades de carga no nulas en el dominio, las cuales son positivas donde la variación es negativa y viceversa. Estas densidades de carga producen, a su vez, la aparición de campos eléctricos no nulos que tienden a aumentar las variaciones de N_e , aunque su impacto es relativamente pequeño. En los resultados mostrados en la Fig. 7.1 no se tiene en cuenta el efecto de los campos eléctricos auto generados, no obstante, se ha verificado que cuando estos se tienen en cuenta, el comportamiento es similar en todos los casos.

A partir de la Fig. 7.1, se aprecia que los esquemas de diferencias finitas son los que mayores desviaciones presentan respecto de la condición inicial, siendo éstas un orden de magnitud mayores que en los esquemas de volúmenes finitos. Como es esperable, el esquema de Lax-Wendroff con aproximación centrada para las derivadas desarrolla oscilaciones muy pronunciadas en el espacio, las cuales no son disipadas por el esquema numérico, como si ocurre con el de primer orden. Las menores variaciones de la densidad se obtuvieron con el esquema de volúmenes finitos con reconstrucción centrada de cuarto orden, sin embargo, la falta de disipación numérica de este esquema es puesta en evidencia por las abruptas oscilaciones espaciales. Por su parte, el esquema FV con reconstrucción de tercer orden UP3 da lugar a desviaciones del equilibrio mayores que el FV - CD4 pero sin el comportamiento oscilatorio no deseado.

En las Figuras 7.2 y 7.3 se muestra la evolución temporal de las variaciones en las normas L_1 y L_2 de f_e , en la masa total integrada sobre todo el dominio, en las cantidades de movimiento en las direcciones radial ($r - momentum$) y azimutal ($\theta - momentum$), y en la energía cinética total (ε_k). Se observa que ni la masa total ni la norma $\|f\|_1$ se conservan de manera exacta en el tiempo, lo cual está de acuerdo con las variaciones espaciales en la densidad de partículas observadas en la Fig. 7.1. Si bien los esquemas de volúmenes finitos son en esencia conservativos, las condiciones de borde empleadas no garantizan que el flujo sea nulo a través de los contornos, y es esta la razón por la cual se desarrollan variaciones en el tiempo de $\|f\|_1$ y de la masa total, aunque se destaca

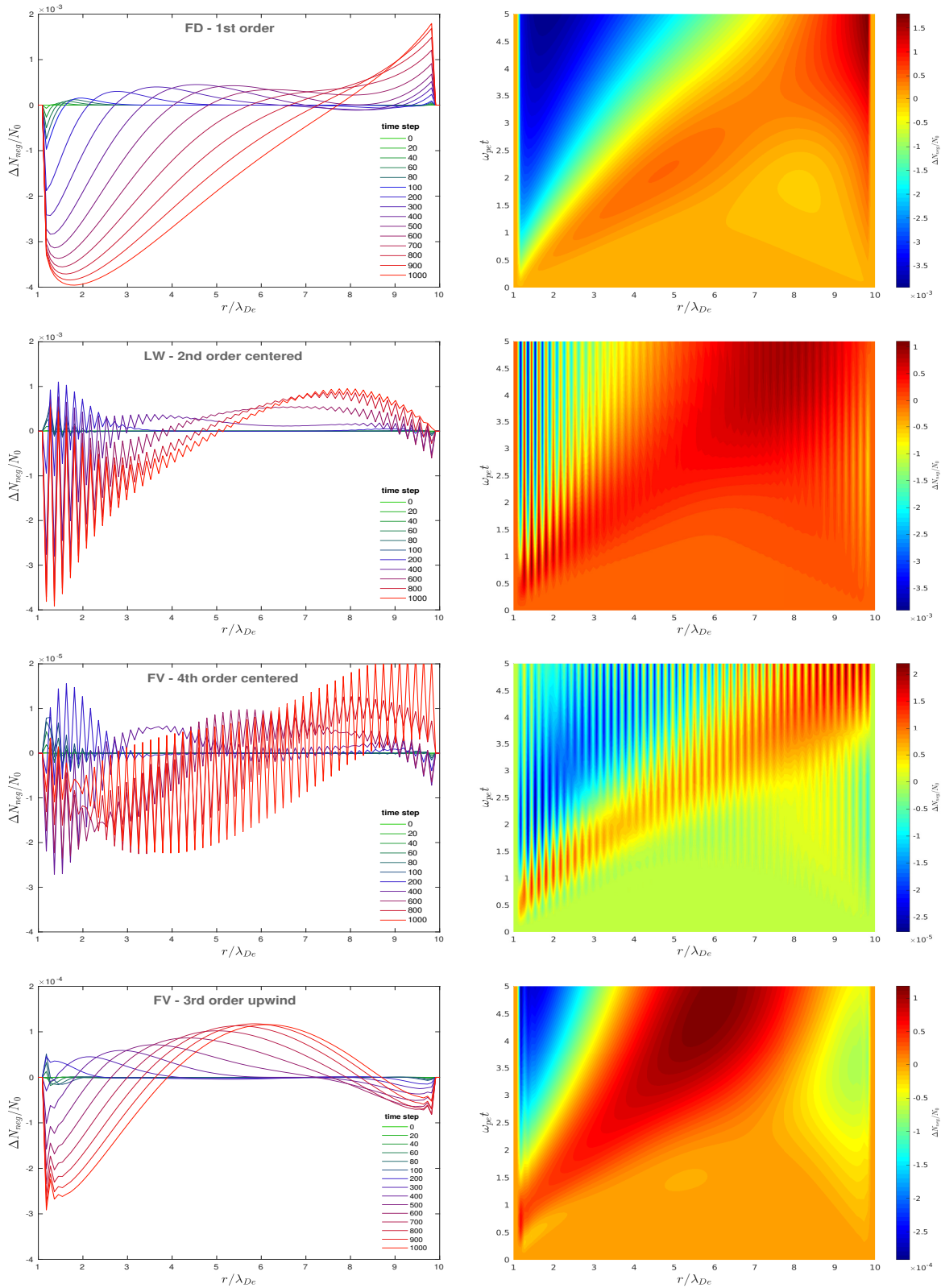


Figura 7.1: Evolución espacio-temporal de la variación en la densidad de electrones a partir de una función de distribución de equilibrio y uniforme en el espacio. Izquierda: ΔN_e en función del radio para distintos tiempos. Derecha: ΔN_e en función de r y t . La resolución de la grilla es: $N_r = 100$, $N_{v_r} = 100$ y $N_{v_\theta} = 100$. El paso de tiempo es: $\Delta t = 1,0E - 03 / \omega_{pe}$.

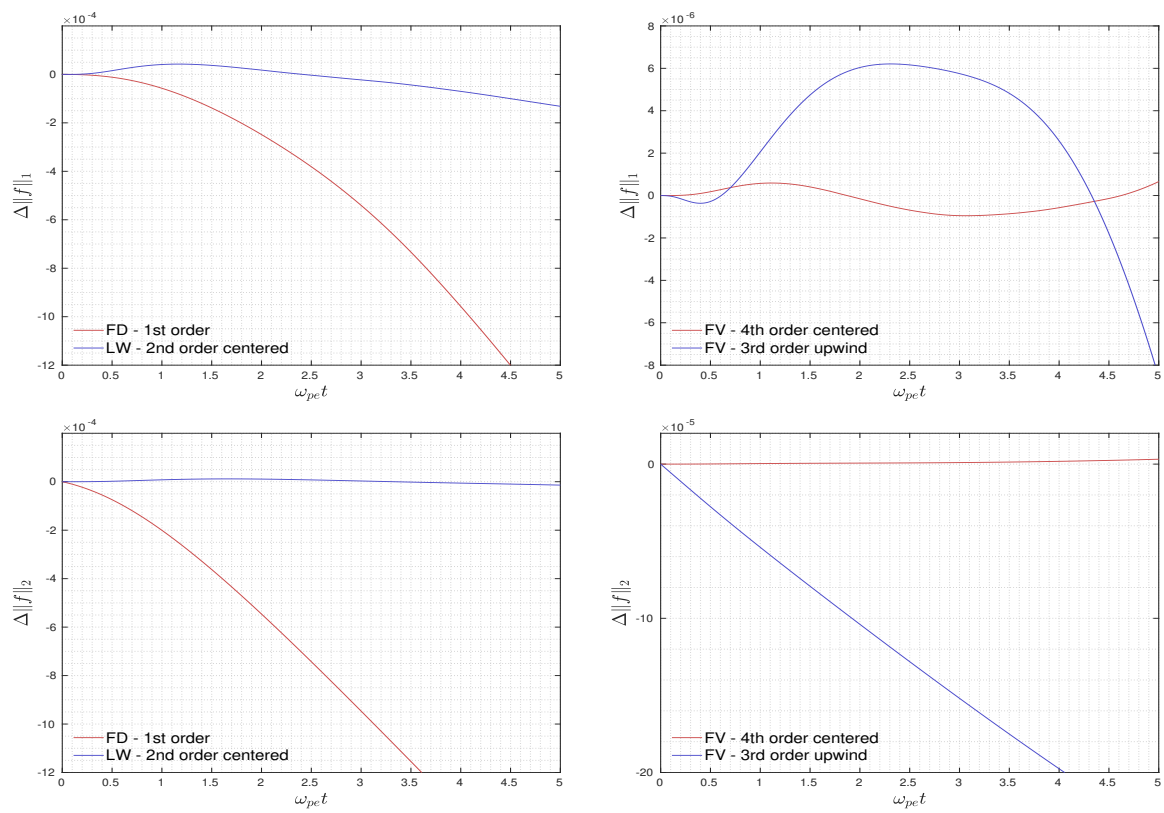


Figura 7.2: Evolución temporal de la norma L_1 de f_e (arriba), y de la norma L_2 de f_e (abajo), a partir de una función de distribución de equilibrio y uniforme en el espacio.

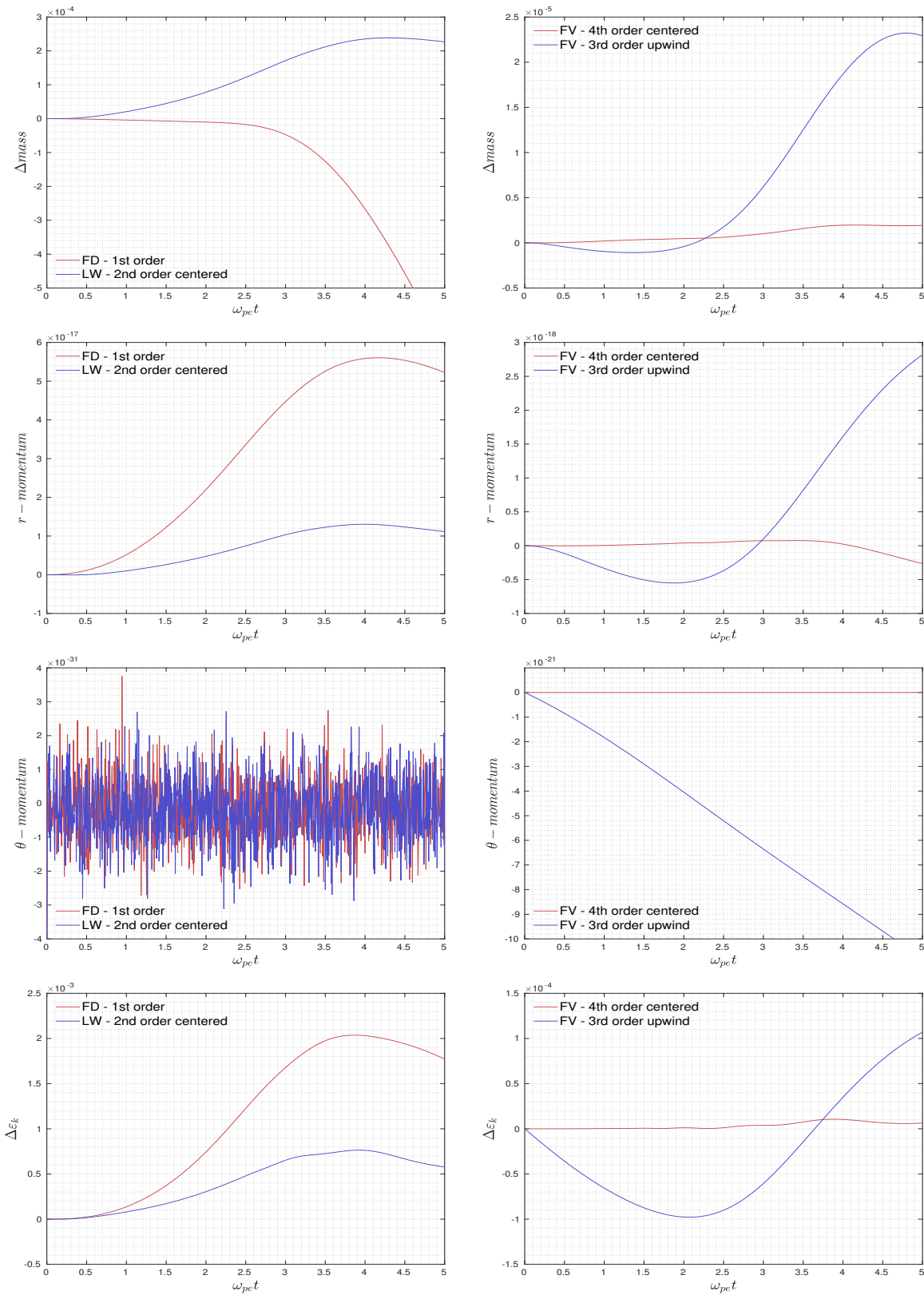


Figura 7.3: De arriba hacia abajo: Evolución temporal de la variación en la masa total Δ_{mass} , de la cantidad de movimiento total en dirección radial $r - momentum$ y azimutal $\theta - momentum$, y de la variación en la energía cinética total $\Delta \varepsilon_k$.

que dichas variaciones son dos órdenes de magnitud menores que las observadas en los esquemas de diferencias finitas.

La cantidad de movimiento en dirección radial, integrada sobre todo el dominio, aumenta inicialmente para luego comenzar a disminuir, indicando que la función de distribución experimenta un corrimiento en el espacio de velocidades respecto de la distribución de Maxwell-Boltzmann original. Esta es un orden de magnitud mayor en los esquemas FD que en los esquemas FV, siendo la reconstrucción CD4 la que produce la cantidad mínima de cantidad de movimiento en r . Por su parte, la cantidad de movimiento en la dirección azimutal se mantiene nula para la precisión de la computadora con todos los esquemas. El comportamiento en el tiempo de la variación en la energía cinética integrada sobre todo el volumen es cualitativamente muy similar al de la cantidad de movimiento radial, siendo superior en los esquemas de diferencias finitas y mínima en el esquema FV con reconstrucción centrada de cuarto orden.

7.2. Sonda de Langmuir cilíndrica

El estudio de la recolección de corriente en objetos conductores inmersos en un plasma es de fundamental importancia para muchas aplicaciones como la caracterización de plasmas de laboratorio (Mott-Smith y Langmuir, 1926), o el diseño de amarras espaciales electrodinámicas (Sanmartin et al., 1993). También es relevante para el problema de la carga de vehículos espaciales, el cual ha impulsado el desarrollo de códigos por parte de las principales agencias espaciales a nivel mundial. La mayoría de estos códigos usan métodos de partículas (PIC) para resolver el sistema de Vlasov-Poisson y encontrar soluciones estacionarias al problema de la carga.

Los primeros trabajos sobre la recolección de corriente en sondas de Langmuir asumían condiciones estacionarias (Bernstein y Rabinowitz, 1959; Laframboise, 1973; Sanmartin y Estes, 1999) y, como consecuencia de esto, despreciaban la población de partículas atrapadas en trayectorias cerradas. El cómputo de las partículas atrapadas requiere, necesariamente, la solución de la ecuación de Vlasov (no estacionaria).

Aquí, se considera que inicialmente el plasma y la sonda están en equilibrio, entonces el potencial de la sonda se cambia repentinamente desde cero hasta un valor finito. Bajo estas condiciones, se produce un sobrepaso de la corriente de iones por encima de la llamada corriente de movimiento orbital limitado (OML). Por esta razón, la densidad del plasma puede exceder localmente a la densidad del plasma sin perturbar lo que remarca la importancia de tener en cuenta el transitorio.

La recolección de corriente no estacionaria ya ha sido estudiada usando tanto códigos tipo PIC (Calder y Laframboise, 1990; Iza y Lee, 2006), como códigos Eulerianos. El programa Kilaps desarrollado en la Universidad Politécnica de Madrid implementa un

código de Vlasov directo basado en diferencias finitas (ver Sección 6.2.1) para resolver el sistema Vlasov-Poisson sobre una geometría cilíndrica (Sánchez-Arriaga, 2013).

Se considera un plasma Maxwelliano ideal, no colisional y no magnetizado, compuesto por electrones e iones de hidrógeno (p^+) con temperaturas T_e y T_i , respectivamente, y una densidad sin perturbar n_0 para ambas especies. Notar que, a diferencia de todos los problemas anteriores, en este caso los iones positivos se consideran móviles y sujetos a las fuerzas de interacción eléctrica. Inicialmente, el plasma está en equilibrio con una sonda cilíndrica perfectamente absorbente de radio r_p y potencial nulo. Un instante de tiempo después, en $t = 0^+$, la sonda se polariza súbitamente a un potencial finito ϕ_p , ante lo cual reaccionan los iones y electrones hasta alcanzar un nuevo estado estacionario.

El dominio numérico tridimensional está delimitado por $r \in [r_p, r_{max}]$ en el espacio físico, y por $[-v_{max}, v_{max}]$ en el espacio de velocidades, tanto en la dirección de v_r como de v_θ . El límite interno del dominio físico coincide con el perímetro de la sonda de Langmuir, y el límite externo r_{max} se adopta lo suficientemente lejos como para asumir que la función de distribución no se ve perturbada por la presencia de la sonda. Por su parte, los límites del espacio de velocidades deben ser suficientemente grandes como para poder asumir que la función de distribución se desvanece completamente. Si bien se adoptan los mismos límites en ambas direcciones, v_r y v_θ , estos deben elegirse independientemente para cada especie ya que la forma de la distribución de velocidades de una especie depende de la masa de las partículas.

Como condiciones de contorno para la función de distribución, se considera una distribución de Maxwell-Boltzmann ideal en r_{max} , y una función nula en r_p para velocidades radiales positivas. Esto último es consistente con la suposición de que la sonda es perfectamente absorbente, es decir, que no emite partículas. En cuanto a los límites del espacio de velocidades, se asume que la cantidad de partículas con esas velocidades ($\pm v_{max}$) es despreciable. Las condiciones de contorno para f_s se resumen como:

$$f_s(t, r_p, v_r > 0, v_\theta) = 0 \quad (7.14)$$

$$f_s(t, r_{max}, v_r, v_\theta) = f_{0s}(v_r, v_\theta) \quad (7.15)$$

$$f_s(t, r_p, \pm v_{max}, v_\theta) = 0 \quad (7.16)$$

$$f_s(t, r_p, v_r, \pm v_{max}) = 0 \quad (7.17)$$

Las condiciones de borde para el potencial electrostático se escogen de Dirichlet en ambos extremos:

$$\varphi(t > 0, r_p) = \varphi_p \quad (7.18)$$

$$\varphi(t, r_{max}) = 0 \quad (7.19)$$

La segunda condición (Ec. 7.19) será físicamente aceptable siempre que r_{max} sea lo suficientemente grande, ya que lejos de la zona de influencia de la sonda, se supone que el potencial tiende asintóticamente a cero.

Los parámetros iniciales del modelo físico usados para las simulaciones de este problema son las temperaturas $T_e = T_i = 1,0E05 K$, la densidad de ambas especies $n_0 = 1,0E10 \text{ } 1/m^3$, y las masas de electrones y protones cuya relación es $m_i/m_e = 1836,153$. El radio de la sonda de Langmuir cilíndrica es $r_p = 0,5 \lambda_{De}$ y el potencial que se impone en la sonda respecto del plasma sin perturbar es $\varphi_p = 15 \text{ } k_B T_e / e$. Por su parte, los valores adoptados para los límites del dominio son $r_{max} = 100 \lambda_{De}$, $v_{max} = 8 v_{the}$ para los electrones, y $v_{max} = 8 v_{thi}$ para los protones, siendo $v_{thi} = v_{the} \sqrt{m_e/m_i}$.

La grilla numérica es estructurada y uniforme, con $N_r = 140$ nodos en la dirección radial y $N_{v_r} = N_{v_\theta} = 64$ nodos en las direcciones de velocidad. Considerando que la dinámica del problema se encuentra concentrada en las cercanías de la sonda, una potencial mejora para la discretización es el uso de grillas estructuradas pero no uniformes, sino que tengan refinamiento gradual o local en la dirección radial en la parte del dominio adyacente a la sonda. El paso de tiempo empleado es $\Delta t = 0,001 \text{ } 1/\omega_{pe}$, ya que está restringido por condiciones de estabilidad del tipo CFL. Las simulaciones se extienden durante 200000 pasos de tiempo, dando un tiempo total simulado $t = 200 \text{ } 1/\omega_{pe}$. Si bien para el final de las simulaciones no se ha alcanzado aún un estado estacionario, las variaciones observadas desde ahí en adelante son muy pequeñas.

A continuación se presentan y comparan los resultados obtenidos con el esquema de diferencias finitas descrito en la Sección 6.2.1 y el de volúmenes finitos introducido en la Sección 6.3. Con fines comparativos, se muestran resultados adicionales conseguidos con el esquema de diferencias finitas pero usando una malla ligeramente más densa, con $N_r = 280$ y $N_{v_r} = N_{v_\theta} = 96$. Los límites del dominio de velocidades adoptados para esta última discretización son un poco mayores para reducir aun más el efecto de los bordes, siendo $v_{max} = 10 v_{the}$ para los electrones, y $v_{max} = 10 v_{thi}$ para los iones positivos.

La Figura 7.4 muestra la evolución espacio-temporal de la densidad de electrones (izquierda) y la variación en el espacio de N_e para distintos instantes de tiempo (derecha). Al polarizar abruptamente la sonda con un potencial positivo, los electrones son atraídos rápidamente en dirección a la sonda produciendo una zona de gran densidad de electrones al principio de la simulación. Dicho pico de densidad da lugar a un comportamiento oscilatorio de N_e en la vaina que se amortigua en el tiempo hasta tender a un valor constante. Por su parte, la evolución espacio-temporal de la densidad de iones N_i es representada en la Fig. 7.5. La densidad de iones presenta un máximo por encima de la densidad del plasma sin perturbar n_0 durante el transitorio, para luego tender asintóticamente a un estado estacionario.

Los resultados obtenidos con las tres discretizaciones mostradas son cualitativamente

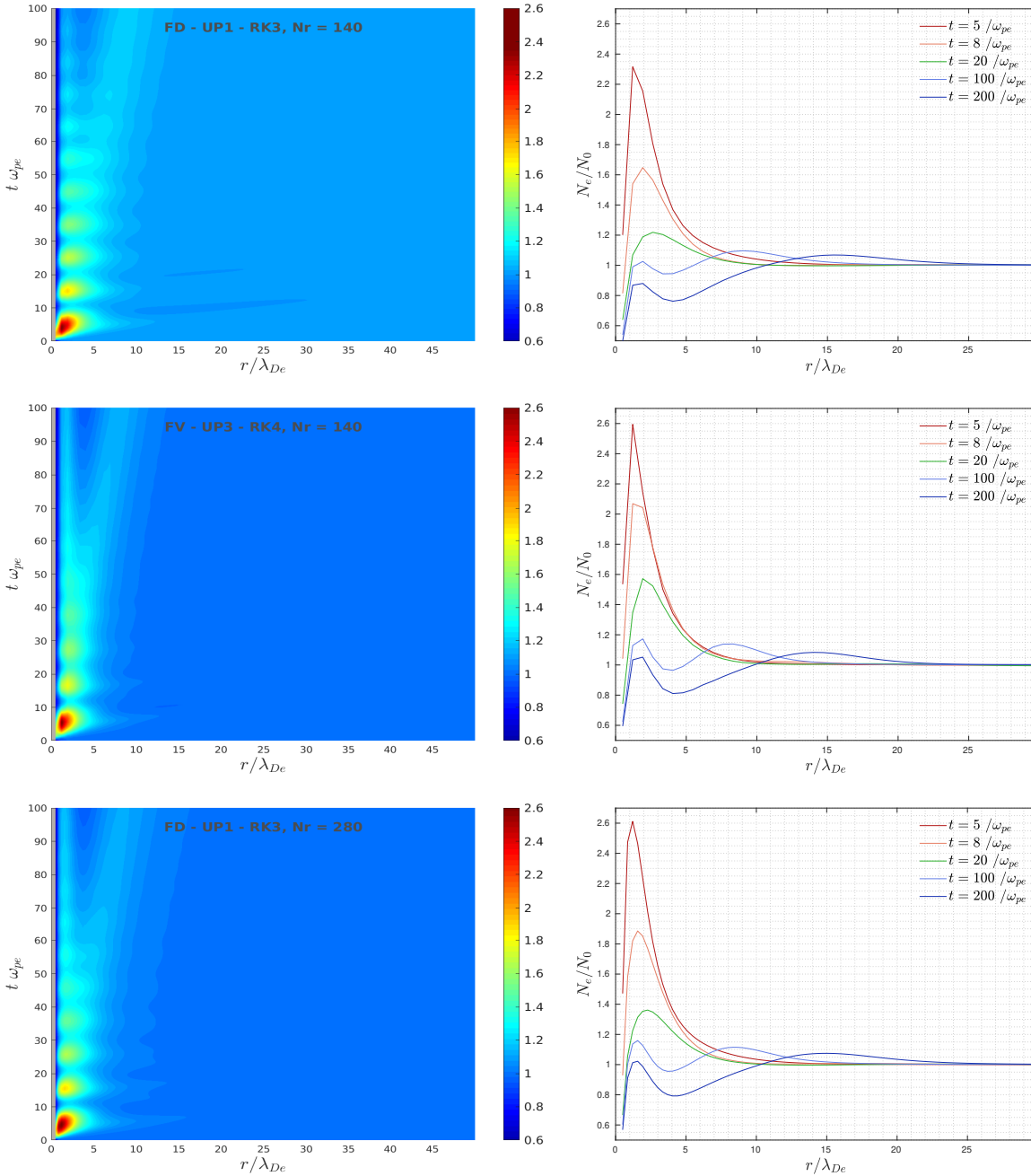


Figura 7.4: Evolución espacio-temporal de N_e (izquierda) y variación espacial de N_e para distintos instantes de tiempo (derecha), obtenidas con los distintos métodos. Esquemas de arriba a abajo: FD de primer orden con $Nr = 140$, FV de tercer orden con $Nr = 140$, y FD de primer orden con $Nr = 280$. Paso de tiempo: $\Delta t = 0,001 1/\omega_{pe}$.

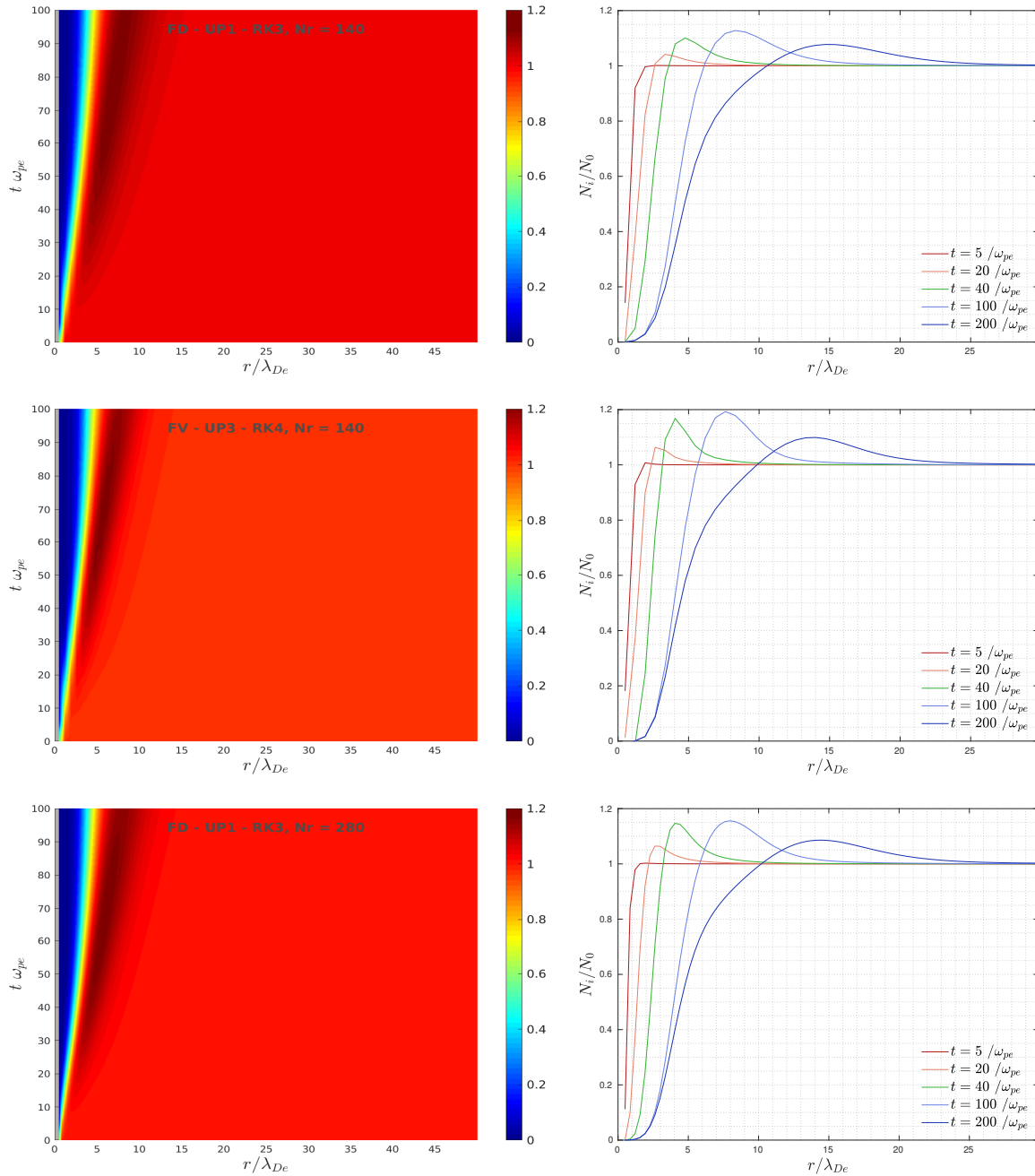


Figura 7.5: Evolución espacio-temporal de N_i (izquierda) y variación espacial de N_i para distintos instantes de tiempo (derecha), obtenidas con los distintos métodos. Esquemas de arriba a abajo: FD de primer orden con $Nr = 140$, FV de tercer orden con $Nr = 140$, y FD de primer orden con $Nr = 280$. Paso de tiempo: $\Delta t = 0,001 1/\omega_{pe}$.

muy similares. Las oscilaciones en N_e son amortiguadas ligeramente más rápido en el esquema FD con la malla gruesa, lo cual es característico de la naturaleza disipativa de los esquemas upwind de primer orden. Viendo las curvas de la izquierda de la Fig. 7.4, se aprecia que los resultados del esquema FD con la malla más fina son más parecidos a los del esquema de volúmenes finitos que los del de diferencias finitas con la malla sin refinar. Algo semejante puede observarse en la evolución de N_i .

En la Fig. 7.6 se grafica la función de distribución de electrones f_e en el plano de velocidades $v_r - v_\theta$, obtenida al final de la simulación ($t = 200 \ 1/\omega_{pe}$) para distintos valores de la coordenada radial. En $r = r_p$, la función de distribución tiene la forma de medio disco, ya que como la sonda es perfectamente absorbente, no hay partículas con velocidad radial positiva. A medida que nos alejamos de la sonda, f_e se vuelve finita en la región con $v_r > 0$. Asimismo, se aproxima progresivamente a una distribución de Maxwell-Boltzmann al acercarnos al límite exterior del dominio espacial. Nuevamente, las tres discretizaciones arrojaron resultados muy similares. Una diferencia que se destaca es que, al acercarnos al límite exterior del dominio físico (r_{max}), los esquemas de diferencias finitas presentan oscilaciones espurias en el espacio de velocidades en la región con $v_r > 0$ y v_θ próxima a 0, las cuales no aparecen en el esquema FV.

Las densidades máximas y sobre la superficie de la sonda, de iones y electrones, son valores característicos de este problema, y su evolución temporal se muestra en las Figuras 7.7 y 7.8, respectivamente. Como ya se había apreciado, la densidad de electrones en $r = r_p$ se incrementa inicialmente muy por encima de la densidad sin perturbar n_0 para luego decaer hacia un valor constante de aproximadamente $0,5 n_0$. Esta tendencia es compartida por los tres esquemas mostrados, sin embargo, se encuentra una pequeña diferencia en los valores máximos alcanzados. Con el esquema FV y con el FD de grilla fina, N_e alcanza un pico de aproximadamente $2,6 n_0$ en $t = 5 \ 1/\omega_{pe}$, mientras que con el esquema FD de grilla gruesa, el valor máximo es de poco más de $2,3 n_0$ en $t = 4 \ 1/\omega_{pe}$.

Finalmente, se muestra en la Fig. 7.9 una comparación de las distribuciones espaciales del potencial electrostático obtenidas con los distintos esquemas para varios instantes de tiempo. Inicialmente, las curvas se separan notablemente, no obstante, la diferencia entre ellas va disminuyendo a medida que progresa la simulación. Las diferencias iniciales no son tan preocupantes como consecuencia de que el potencial en sí no es una cantidad medible, sino que la que tiene significado físico es su derivada primera, es decir, el campo eléctrico.

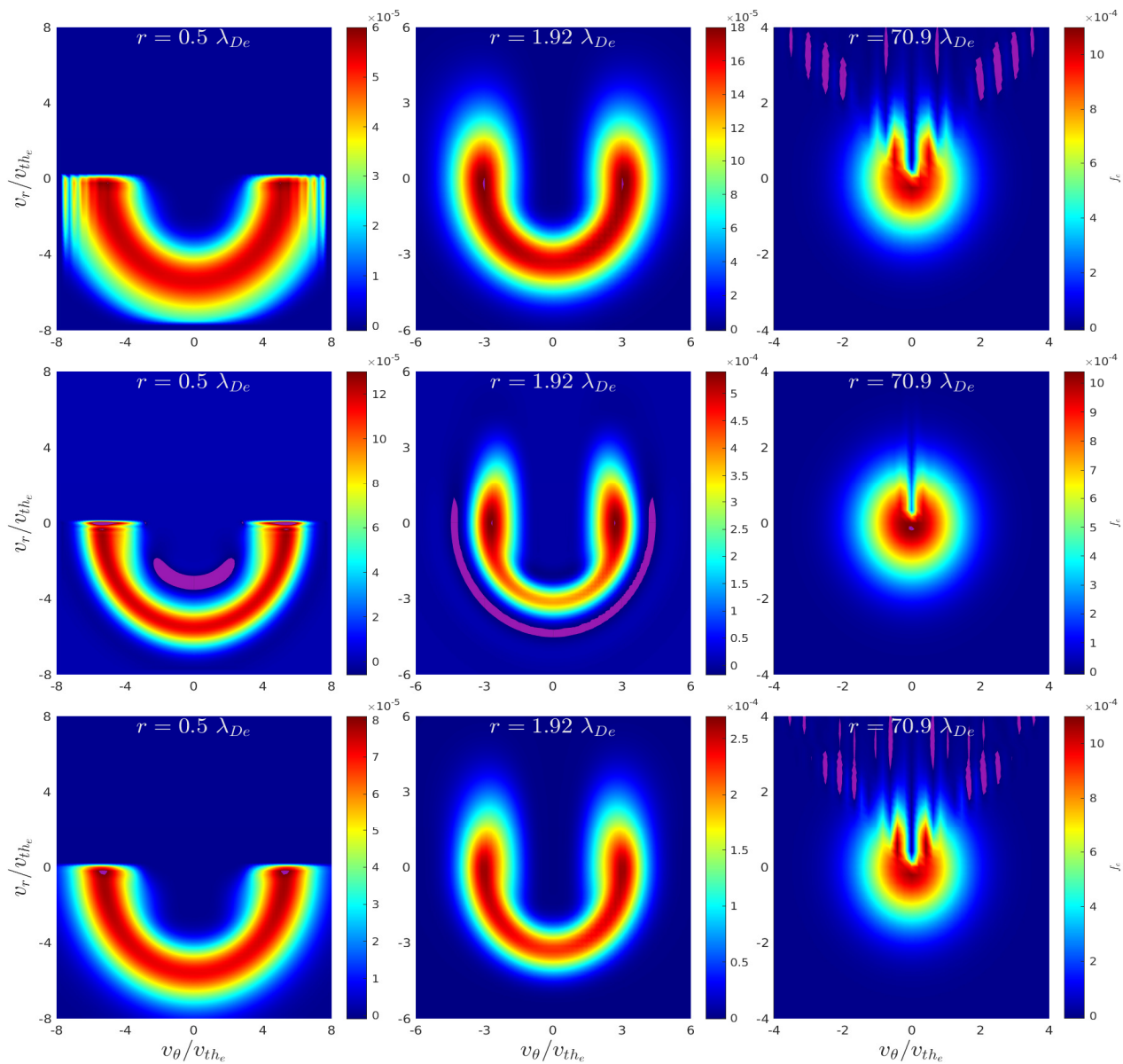


Figura 7.6: Función de distribución electrónica f_e en el plano de velocidades $v_r - v_\theta$ al final de la simulación $t = 200 \ 1/\omega_{pe}$, para distintos valores de la coordenada radial r . Esquemas de arriba hacia abajo: FD de primer orden con $Nr = 140$, FV de tercer orden con $Nr = 140$, y FD de primer orden con $Nr = 280$. Paso de tiempo: $\Delta t = 0,001 \ 1/\omega_{pe}$.

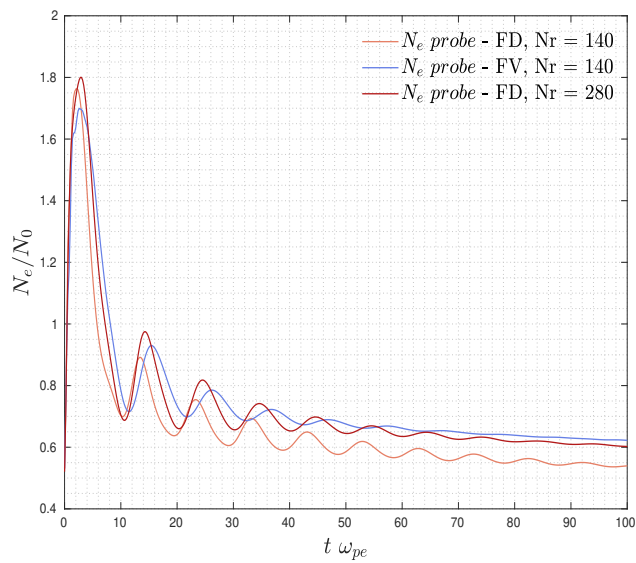


Figura 7.7: Evolución temporal de la densidad de electrones N_e sobre la sonda ($r = 0,5 \lambda_{De}$). Comparación entre los distintos esquemas.

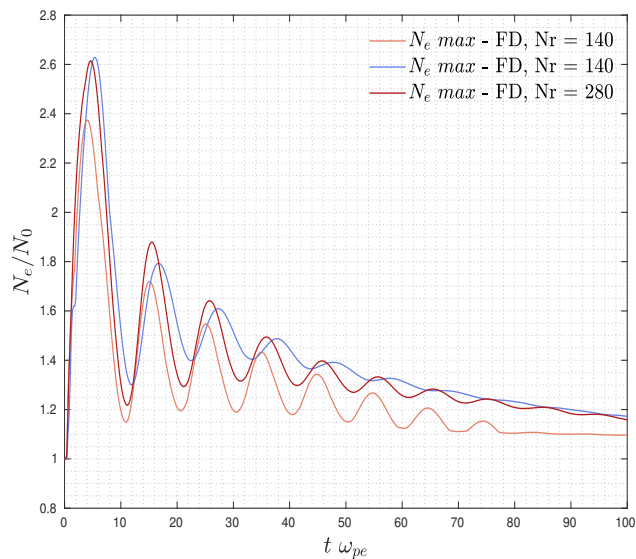


Figura 7.8: Evolución temporal de la densidad de electrones N_e máxima. Comparación entre los distintos esquemas.

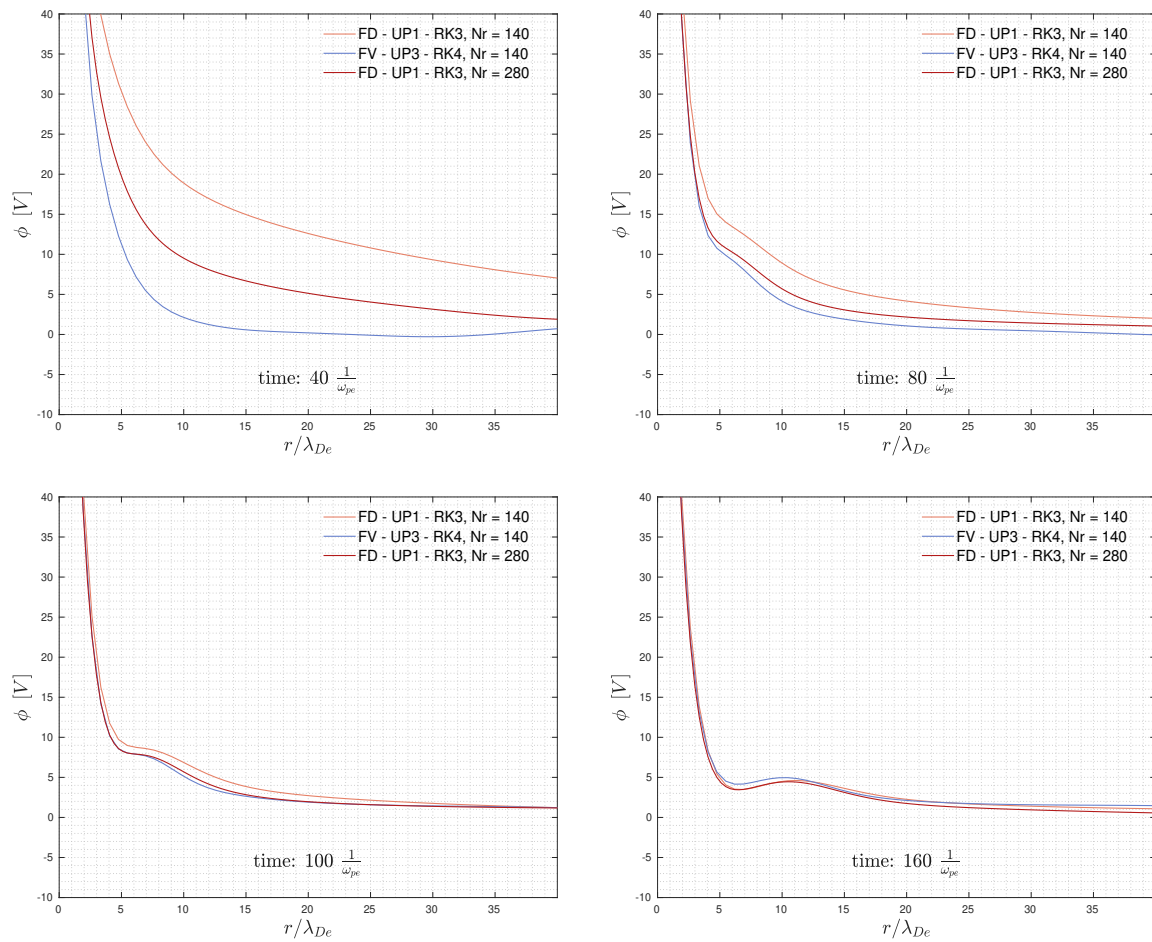


Figura 7.9: Distribución espacial del potencial electrostático para distintos instantes de tiempo. Comparación entre esquemas.

Capítulo 8

Conclusiones

En la investigación aquí presentada se han estudiado y se ha realizado la implementación computacional de los métodos numéricos existentes, basados en diferencias finitas, volúmenes finitos, y semi-Lagrangianos, para la solución del sistema Vlasov-Poisson en geometrías rectangulares y axialmente simétricas. Las características de los distintos métodos, y los resultados obtenidos con cada uno, han sido analizados y comparados.

Todos los objetivos específicos propuestos fueron alcanzados satisfactoriamente. Se ha estudiado la teoría cinética de plasmas y las formulaciones matemáticas que describen la evolución de la función de distribución, en particular, la ecuación de Vlasov no relativista en sus formas advectiva y conservativa, en coordenadas cartesianas y cilíndricas. Asimismo, se ha logrado clasificar una jerarquía de modelos electromagnéticos, desde el más complejo hasta el más simplificado, que pueden servir como complemento a la ecuación de Vlasov para el cálculo de los campos.

Se ha revisado exhaustivamente la literatura científica sobre métodos numéricos para la ecuación de Vlasov, y se han estudiado e implementado computacionalmente los esquemas basados en diferencias finitas, semi-Lagrangianos advectivos y conservativos, y los basados en volúmenes finitos. Para comparar la precisión y las propiedades de conservación de los esquemas se llevó a cabo una serie de pruebas numéricas clásicas. Algunos de los resultados de este estudio ya fueron publicados (Lorenzon y Elaskar, 2019, 2020), y otros están en revisión (Lorenzon y Elaskar, 2021; Lorenzon et al., 2021).

Algunos esquemas de diferencias finitas y volúmenes finitos formulados en coordenadas cilíndricas fueron implementados para la simulación de problemas axialmente simétricos. Se evaluó la capacidad de los esquemas para preservar una función de distribución de equilibrio uniforme en el espacio y se simuló la evolución de la estructura del plasma en las inmediaciones de una sonda de Langmuir cilíndrica. Actualmente, se está preparando un artículo sobre métodos computacionales para el estudio numérico de sondas de Langmuir.

Los métodos de diferencias finitas son los más simples conceptualmente, además de ser los más fáciles de implementar numéricamente. Los semi-Lagrangianos advectivos com-

parten con los FD la discretización del dominio, ya que también buscan valores puntuales de las variables primarias en los nodos, no obstante, su complejidad adicional reside en la determinación del origen de las características y la interpolación. Por otra parte, los semi-Lagrangianos conservativos tienen más en común con los métodos de volúmenes finitos que con los SL advectivos, ya que buscan valores promediados o integrados sobre celdas en vez de valores puntuales. La diferencia entre los SL conservativos y los FV es la forma en la que se calculan los flujos. Si se desean conseguir aproximaciones de alto orden en los esquemas de volúmenes finitos, es necesario utilizar reglas de cuadratura basadas en la expansión en series de Taylor de las variables primarias.

Las pruebas numéricas realizadas en coordenadas cartesianas arrojaron, en general, buenos resultados para casi todos los esquemas implementados. Los esquemas de Lax-Friedrichs y semi-Lagrangiano con interpolación lineal se incluyeron solamente como ejemplos de esquemas que son demasiado disipativos como para proporcionar resultados valiosos, lo cual fue verificado claramente en los problemas del amortiguamiento débil y fuerte de Landau. La tasa de amortiguamiento obtenida con todos los demás esquemas concuerda precisamente con la predicha por la teoría lineal.

En el amortiguamiento lineal, todos los esquemas conservativos, y también los de diferencias finitas de segundo orden, conservan la norma L_1 de f con la precisión de la computadora. En cuanto a la conservación de la norma L_2 , las mejores propiedades son presentadas por los esquemas FD y los advectivos. Como era de esperarse, los conservativos y los FV son los que peor conservan la norma L_2 por ser los más disipativos. Esto último fue comprobado nuevamente al evaluar la conservación de la entropía cinética, donde los esquemas conservativos produjeron el mayor aumento. En términos generales, puede decirse que con la resolución usada para las mallas, todos los esquemas presentan resultados similares y muy consistentes, y son igualmente aptos para la simulación de problemas lineales.

En el amortiguamiento no lineal, se aprecia que la evolución temporal del logaritmo de la norma L_2 del campo eléctrico obtenida con los distintos esquemas tiene muy buena correlación con las pendientes predichas por la teoría. En esta prueba, se ha observado también el desarrollo de la filamentación y cómo las pequeñas estructuras del espacio de fases son disipadas en el tiempo. Se observa que los esquemas semi-Lagrangianos con interpolación polinómica en forma de Lagrange son más disipativos que los que usan interpolación de Hermite, no obstante, los SL conservativos son los más disipativos de todos. Por su parte, la disipación de los métodos de volúmenes finitos depende de la reconstrucción usada, siendo las reconstrucciones de tipo *upwind* más disipativas que las centradas.

Durante la inestabilidad de las dos corrientes con la condición inicial A, todos los esquemas conservan la norma $\|f\|_2$ y mantienen el mínimo de f_e muy próximo a 0, pero

luego de un tiempo, cuando la filamentación ya no puede ser resuelta en la grilla, $\|f\|_2$ empieza a disminuir mientras que los valores mínimos de la función de distribución se hacen cada vez más negativos. Los esquemas SL conservativos son los que muestran una caída más abrupta de la norma L_2 . Los esquemas basados en diferencias finitas y los FV con reconstrucciones centradas conservan $\|f\|_2$ con buena precisión pero rápidamente dan lugar a valores cada vez más negativos de f .

Las otras dos condiciones iniciales para la inestabilidad de las dos corrientes arrojaron resultados cualitativamente similares. Al final de la simulación, se desarrollaron en el espacio de fases oscilaciones espurias evidentes en los de diferencias finitas y, principalmente, en el FV - CD4. Por su parte, los SL conservativos no muestran oscilaciones al ser los más disipativos. Los métodos FV con reconstrucción upwind ponderada de tercer orden y FV con reconstrucción UP5 proporcionan los mejores resultados en este caso, al ser poco disipativos pero sin dar lugar a oscilaciones indeseadas.

La prueba de performance realizada sirvió para contrastar la precisión de los distintos esquemas contra el tiempo de cómputo necesario con cada uno. Esto es útil ya que es más importante la precisión a igual tiempo de cómputo que la precisión a igual resolución de la malla. Los esquemas de diferencias finitas son los que tienen el menor costo computacional, seguidos de cerca por los SL con interpolación polinómica y los SL conservativos sin funciones limitadoras. La interpolación con splines cúbicos es muy costosa debido a que interpolar cada punto unidimensional requiere la resolución de un sistema de ecuaciones lineales. En el caso de los SL conservativos, el cálculo de las funciones limitadoras causa que cada paso demande entre 4 y 6 veces más tiempo. El costo computacional de los esquemas de volúmenes finitos no es significativamente sensible al tipo de reconstrucción usada. En el caso de emplear el esquema ponderado, el tiempo de ejecución aumenta entre 4 y 5 veces como consecuencia del cálculo de los pesos.

La implementación de los métodos en coordenadas cilíndricas, para la solución de problemas axialmente simétricos, adiciona ciertas complejidades tanto a los métodos numéricos como a la implementación. Si bien en el caso axialmente simétrico las variables no dependen de θ , es importante tener en cuenta esta coordenada ya que interviene en la integración de los flujos en los métodos de volúmenes finitos. Además, cuando la ecuación de Vlasov se escribe sobre una geometría cilíndrica, los términos correspondientes a la aceleración centrífuga y de Coriolis impiden aplicar el splitting dimensional de forma tan directa.

Se ha evaluado la habilidad de los esquemas basados en diferencias finitas y volúmenes finitos para preservar una función de distribución de equilibrio y uniforme. En este caso, todos los términos de la ecuación de Vlasov en coordenadas cilíndricas son nulos o se cancelan mutuamente de forma analítica, pero en la práctica, ningún esquema numérico puede mantener en el tiempo la distribución uniforme a causa de los errores de truncamiento.

Desde el comienzo de la simulación, los errores numéricos causan que los términos correspondientes a las aceleraciones de Coriolis y centrífuga no se cancelen entre sí perturbando el equilibrio inicial y dando lugar a variaciones espaciales de la densidad de partículas. Estas variaciones aparecen cerca de los extremos del dominio físico y se propagan luego hacia el interior, siendo mucho más pronunciadas en la proximidad del límite interno debido a que las velocidades de advección son inversamente proporcionales al radio. Los esquemas de diferencias finitas presentan mayores desviaciones respecto de la condición inicial que los esquemas de volúmenes finitos. El esquema FV con reconstrucción de tercer orden UP3 da lugar a desviaciones del equilibrio mayores que el FV - CD4 pero sin el comportamiento oscilatorio no deseado.

La importancia de la implementación de los esquemas en geometrías cilíndricas y axialmente simétricas reside en sus aplicaciones prácticas, como la caracterización de plasmas de laboratorio mediante sondas de Langmuir cilíndricas o el diseño de amarras espaciales electrodinámicas. Con esto en mente, se simuló el caso de un objeto cilíndrico conductor inmerso en el plasma cuyo potencial varía abruptamente desde cero hasta un valor positivo relativamente grande. Tanto los electrones como los iones reaccionan ante esta polarización oscilando hasta alcanzar un nuevo estado estacionario.

Las evoluciones espacio-temporales de las densidades de partículas obtenidas con el esquema FD de primer orden y con el FV de tercer orden son cualitativamente muy similares, siendo las oscilaciones en N_e amortiguadas ligeramente más rápido con el esquema de diferencias finitas upwind. Observando la función de distribución electrónica obtenida al final de la simulación con los esquemas FD, se aprecia la presencia de oscilaciones espurias en el espacio de velocidades en los puntos próximos al límite exterior del dominio espacial, las cuales no aparecen con los esquemas FV. En cuanto a la evolución de la densidad máxima de electrones, se encontró una pequeña diferencia entre ambas discretizaciones. Con el esquema FV, N_e alcanza un pico de aproximadamente $2,6 n_0$ en $t = 5 \ 1/\omega_{pe}$, mientras que con el esquema FD de igual resolución, el valor máximo es de poco más de $2,3 n_0$ en $t = 4 \ 1/\omega_{pe}$. Esto último sugiere que el esquema de tercer orden captura con mejor precisión los valores máximos y mínimos locales de densidad, al ser ligeramente menos disipativo que el de primer orden.

8.1. Trabajos futuros

Con el presente trabajo se logró construir una base para el desarrollo de métodos computacionales orientados a resolver el sistema de ecuaciones Vlasov-Poisson, y para el estudio numérico de la física de plasmas en el marco de la teoría cinética. A partir de la experiencia adquirida, se proponen futuras líneas de trabajo para la mejora y extensión de los códigos producidos, tanto desde el punto de vista de los modelos físicos como de los métodos numéricos e implementaciones computacionales.

- En todos los trabajos futuros se seguirá considerando el modelo cinético de plasmas, cuya evolución es descrita por la ecuación de Vlasov. Sin embargo, hasta ahora solo se ha estudiado el caso electrostático descrito por la ecuación de Poisson. Una mejora importante a la física será considerar modelos electromagnéticos más completos, empezando por el cuasi-estático, luego el de Darwin y finalmente el dado por las ecuaciones de Maxwell. Esto permitirá estudiar comportamientos dinámicos más complejos e inestabilidades que no aparecen con el modelo electrostático.
- Otro potencial aporte a la física es la inclusión de un término de colisiones en el lado derecho de la ecuación de Vlasov, en cuyo caso dejaría de tratarse de la ecuación de Vlasov. Esto extendería la aplicabilidad de los esquemas al eliminar la suposición de que el plasma es no colisional. Un término de colisiones a considerar es el ampliamente usado operador de Fokker-Planck.
- Muchos de los fenómenos en física de plasmas, y particularmente en la teoría cinética, no ocurren en espacios de fases de dimensión reducida. Por esta razón, es muy importante extender los códigos desarrollados a 4 y 5 dimensiones. Dada esta extensión, será imprescindible optimizar e implementar una paralelización eficiente de los programas a nivel de hilos, ya que los programas presentados aquí solamente incluyen optimizaciones secuenciales y paralelismo a nivel de datos mediante instrucciones SIMD.
- Como mejoras a los esquemas semi-Lagrangianos advectivos se propone el empleo de interpolaciones multidimensionales en lugar del *splitting* temporal, y el uso de funciones de interpolación polinómicas de alto orden que garanticen cierto grado de suavidad global. Asimismo, se proponen reconstrucciones polinómicas de orden igual o mayor a 4 para los esquemas SL conservativos con el fin de reducir su excesiva disipación numérica.
- En el Capítulo 7 se evaluaron y compararon métodos basados en diferencias finitas y en volúmenes finitos para la solución de la ecuación de Vlasov en geometrías

cilíndricas. Este análisis puede ampliarse, agregando a la comparación, esquemas semi-Lagrangianos tanto advectivos como conservativos.

- La técnica de splitting ha resultado ser extremadamente útil para reducir problemas multidimensionales a una serie de problemas 1D, no obstante, el splitting de Strang utilizado no permite conseguir ordenes globales mayores a 2 en la integración temporal. Una alternativa para contrarrestar este inconveniente puede ser el uso de un splitting de alto orden.
- Los esquemas semi discretos de diferencias finitas y volúmenes finitos implementados en coordenadas cilíndricas, usan integradores temporales del tipo Runge-Kutta de cuarto orden, lo cual implica calcular los lados derechos de la ecuación de Vlasov en cada punto del espacio de fases 4 veces por paso de tiempo. El costo computacional correspondiente a un paso de tiempo puede entonces reducirse mediante el empleo de integradores de múltiples etapas del tipo Adams-Bashforth, sin embargo, estos requieren el almacenamiento en memoria de las funciones de distribución de varios pasos de tiempo anteriores. La ganancia o pérdida en términos de tiempo de cómputo que puede lograrse mediante el uso de integradores de múltiples etapas es algo que se determinará como continuación de las pruebas numéricas mostradas hasta aquí.

Bibliografía

- T.D. Arber y R.G.L. Vann. A Critical Comparison of Eulerian-Grid-Based Vlasov Solvers. *Journal of Computational Physics*, 180(1):339–357, 2002. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.2002.7098.
- Kiyoshi Asano y Seiji Ukai. On the Vlasov-Poisson Limit of the Vlasov-Maxwell Equation. En *Studies in Mathematics and Its Applications*, tomo 18, págs. 369–383. Elsevier, 1986. ISBN 978-0-444-70144-2.
- Kendall E Atkinson. *An introduction to numerical analysis*. John Wiley & Sons, New York, 1989. ISBN 978-0-471-50023-0.
- Jeffrey William Banks y Jeffrey Alan Furst Hittinger. 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.
- Sebastian Bauer y Markus Kunze. The Darwin Approximation of the Relativistic Vlasov-Maxwell System. *Annales Henri Poincaré*, 6(2):283–308, 2005. ISSN 1424-0637, 1424-0661. doi:10.1007/s00023-005-0207-y.
- Paul M. Bellan. *Fundamentals of Plasma Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2006. ISBN 978-0-511-80718-3.
- Ira B. Bernstein y Irving N. Rabinowitz. Theory of Electrostatic Probes in a Low-Density Plasma. *Physics of Fluids*, 2(2):112, 1959. ISSN 00319171. doi:10.1063/1.1705900.
- Nicolas Besse, Norbert Mauser, y Eric Sonnendrücker. Numerical Approximation of Self-Consistent Vlasov Models for Low-Frequency Electromagnetic Phenomena. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 17(3):361–374, 2007. ISSN 1641-876X. doi:10.2478/v10006-007-0030-3.
- Charles Kennedy Birdsall y Allan Bruce Langdon. *Plasma physics via computer simulation*. Taylor & Francis, New York, 2005. ISBN 978-0-7503-1025-3.
- J.A. Bittencourt. *Fundamentals of Plasma Physics*. Springer New York, 2004. ISBN 978-0-387-20975-3.

- Jay P Boris y David L Book. Flux-corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *Journal of Computational Physics*, 11(1):38–69, 1973. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(73)90147-2.
- Hale Bradt. *Astrophysics Processes: The Physics of Astronomical Phenomena*. Cambridge University Press, Cambridge, 2008. ISBN 978-0-511-80224-9.
- J. C. Butcher. *Numerical methods for ordinary differential equations*. Wiley, Chichester, England ; Hoboken, NJ, 2nd ed ed^{ón}., 2008. ISBN 978-0-470-72335-7.
- J. A. Byers y J. Killeen. Finite-Difference Methods for Collisionless Plasma Models. *Methods Comput. Phys.*, 9:259 – 305, 1970.
- A. C. Calder y J. G. Laframboise. Time-dependent sheath response to abrupt electrode voltage changes. *Physics of Fluids B: Plasma Physics*, 2(3):655–666, 1990. ISSN 0899-8221. doi:10.1063/1.859300.
- Francis F. Chen. *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion*. Springer International Publishing, Cham, 2016. ISBN 978-3-319-22308-7 978-3-319-22309-4.
- C.Z Cheng y Georg Knorr. 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.
- Yingda Cheng, Irene M. Gamba, Fengyan Li, y Philip J. Morrison. Discontinuous Galerkin Methods for the Vlasov–Maxwell Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 52(2):1017–1049, 2014. ISSN 0036-1429, 1095-7170. doi:10.1137/130915091.
- P Colella, M Dorr, J Hittinger, D F Martin, y P McCorquodale. High-order finite-volume adaptive methods on locally rectangular grids. *Journal of Physics: Conference Series*, 180:012010, 2009. ISSN 1742-6596. doi:10.1088/1742-6596/180/1/012010.
- P. Colella, M.R. Dorr, J.A.F. Hittinger, y D.F. Martin. High-order, finite-volume methods in mapped coordinates. *Journal of Computational Physics*, 230(8):2952–2976, 2011. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2010.12.044.
- Phillip Colella y Paul R Woodward. The Piecewise Parabolic Method (PPM) for gas-dynamical simulations. *Journal of Computational Physics*, 54(1):174–201, 1984. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(84)90143-8.
- N. Crouseilles, M. Gutnic, G. Latu, y E. Sonnendrücker. Comparison of two Eulerian solvers for the four-dimensional Vlasov equation: Part II. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 13(1):94–99, 2008. ISSN 10075704. doi:10.1016/j.cnsns.2007.03.017.

- Nicolas Crouseilles, Pierre Glanc, Michel Mehrenberger, y Christophe Steiner. Finite volume schemes for Vlasov. *ESAIM: Proceedings*, 38:275–297, 2012. ISSN 1270-900X. doi:10.1051/proc/201238015.
- Nicolas Crouseilles, Michel Mehrenberger, y Eric Sonnendrücker. Conservative semi-Lagrangian schemes for Vlasov equations. *Journal of Computational Physics*, 229(6):1927–1953, 2010. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2009.11.007.
- Nicolas Crouseilles, Pierre Navaro, y Éric Sonnendrücker. Charge-conserving grid based methods for the Vlasov–Maxwell equations. *Comptes Rendus Mécanique*, 342(10-11):636–646, 2014. ISSN 16310721. doi:10.1016/j.crme.2014.06.012.
- Nicolas Crouseilles, Thomas Respaud, y Eric Sonnendrücker. A forward semi-Lagrangian method for the numerical solution of the Vlasov equation. *Computer Physics Communications*, 180(10):1730–1745, 2009. ISSN 00104655. doi:10.1016/j.cpc.2009.04.024.
- Carl De Boor. *A practical guide to splines: with 32 figures*. N^o v. 27 en Applied mathematical sciences. Springer, New York, rev. ed ed^{ón}., 2001. ISBN 978-0-387-95366-3.
- G.L. Delzanno. Multi-dimensional, fully-implicit, spectral method for the Vlasov–Maxwell equations with exact conservation laws in discrete form. *Journal of Computational Physics*, 301:338–356, 2015. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2015.07.028.
- C J Diaz. On the Vlasov-Poisson system of equations for an inhomogeneous cylindrical plasma. *Plasma Physics*, 23(5):455–472, 1981. ISSN 0032-1028. doi:10.1088/0032-1028/23/5/007.
- N.V. Elkina y J. Büchner. A new conservative unsplit method for the solution of the Vlasov equation. *Journal of Computational Physics*, 213(2):862–875, 2006. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2005.09.023.
- Nengsheng Fang, Caixiu Liao, y Lung-An Ying. Darwin Approximation to Maxwell’s Equations. En *Computational Science – ICCS 2009*, tomo 5544, págs. 775–784. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009. ISBN 978-3-642-01969-2 978-3-642-01970-8.
- M. R. Feix y Pierre Bertrand. 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.
- Eric Fijalkow. A numerical solution to the Vlasov equation. *Computer Physics Communications*, 116(2-3):319–328, 1999a. ISSN 00104655. doi:10.1016/S0010-4655(98)00146-5.

- Eric Fijalkow. Numerical solution to the Vlasov equation: The 2D code. *Computer Physics Communications*, 116(2-3):336–344, 1999b. ISSN 00104655. doi:10.1016/S0010-4655(98)00148-9.
- F. Filbet, J.-L. Lemaire, y E. Sonnendrücker. Direct Axisymmetric Vlasov Simulations of Space Charge Dominated Beams. En Peter M. A. Sloot, Alfons G. Hoekstra, C. J. Kenneth Tan, y Jack J. Dongarra, eds., *Computational Science — ICCS 2002*, págs. 305–314. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002. ISBN 978-3-540-47789-1.
- F. Filbet y E. Sonnendrücker. Comparison of Eulerian Vlasov solvers. *Computer Physics Communications*, 150(3):247–266, 2003. ISSN 00104655. doi:10.1016/S0010-4655(02)00694-X.
- Francis Filbet, Eric Sonnendrücker, y Pierre Bertrand. Conservative Numerical Schemes for the Vlasov Equation. *Journal of Computational Physics*, 172(1):166–187, 2001. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.2001.6818.
- Réal R.J. Gagné y Magdi M. Shoucri. A splitting scheme for the numerical solution of a one-dimensional Vlasov equation. *Journal of Computational Physics*, 24(4):445–449, 1977. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(77)90032-8.
- Frederick C. Grant y Marc R. Feix. Fourier-Hermite Solutions of the Vlasov Equations in the Linearized Limit. *Physics of Fluids*, 10(4):696, 1967. ISSN 00319171. doi:10.1063/1.1762177.
- Donald A. Gurnett y Amitava Bhattacharjee. *Introduction to Plasma Physics: With Space, Laboratory and Astrophysical Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, 2 ed^{ón}., 2017. ISBN 978-1-139-22605-9.
- E. Hairer, S. P. Nørsett, y Gerhard Wanner. *Solving ordinary differential equations I: nonstiff problems*. N^o 8 en Springer series in computational mathematics. Springer, Heidelberg ; London, 2nd rev. ed ed^{ón}., 2009. ISBN 978-3-540-56670-0 978-3-642-05163-0 978-3-540-78862-1.
- R.E. Heath, I.M. Gamba, P.J. Morrison, y C. Michler. A discontinuous Galerkin method for the Vlasov–Poisson system. *Journal of Computational Physics*, 231(4):1140–1174, 2012. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2011.09.020.
- Roger W. Hockney y James W. Eastwood. *Computer simulation using particles*. A. Hilger, Bristol [England] ; Philadelphia, special student ed ed^{ón}., 1988. ISBN 978-0-85274-392-8.

- Frank Hohl y Marc R. Feix. Numerical Experiments with a One-Dimensional Model for a Self-Gravitating Star System. *The Astrophysical Journal*, 147:1164, 1967. ISSN 0004-637X, 1538-4357. doi:10.1086/149106.
- Richard B. Horne y Mervyn P. Freeman. A New Code for Electrostatic Simulation by Numerical Integration of the Vlasov and Ampère Equations Using MacCormack's Method. *Journal of Computational Physics*, 171(1):182–200, 2001. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.2001.6781.
- F. Huot, A. Ghizzo, P. Bertrand, E. Sonnendrücker, y O. Coulaud. Instability of the time splitting scheme for the one-dimensional and relativistic Vlasov–Maxwell system. *Journal of Computational Physics*, 185(2):512–531, 2003. ISSN 00219991. doi:10.1016/S0021-9991(02)00079-7.
- Felipe Iza y Jae Koo Lee. Particle-in-cell simulations of planar and cylindrical Langmuir probes: Floating potential and ion saturation current. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 24(4):1366–1372, 2006. ISSN 0734-2101, 1520-8559. doi:10.1116/1.2187991.
- John David Jackson. *Classical electrodynamics*. Wiley, New York, 3rd ed ed^{ón}., 1999. ISBN 978-0-471-30932-1.
- A.J. Klimas y W.M. Farrell. A Splitting Algorithm for Vlasov Simulation with Filamentation Filtration. *Journal of Computational Physics*, 110(1):150–163, 1994. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.1994.1011.
- Alexander J Klimas. A method for overcoming the velocity space filamentation problem in collisionless plasma model solutions. *Journal of Computational Physics*, 68(1):202–226, 1987. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(87)90052-0.
- G. Knorr. Zur Lösung der Nicht-linearen Vlasov-Gleichung. *Zeitschrift für Naturforschung A*, 18(12), 1963. ISSN 1865-7109, 0932-0784. doi:10.1515/zna-1963-1209.
- Mikhail N. Kogan. *Rarefied Gas Dynamics*. Springer US, Boston, MA, 1969. ISBN 978-1-4899-6189-1 978-1-4899-6381-9.
- Nicholas A. Krall y Alvin W. Trivelpiece. *Principles of plasma physics*. International series in pure and applied physics. McGraw-Hill, New York, 1973. ISBN 978-0-07-035346-6.
- J. G. Laframboise. Probe design for orbit-limited current collection. *Physics of Fluids*, 16(5):629, 1973. ISSN 00319171. doi:10.1063/1.1694398.
- A. Bruce Langdon. Kinetic theory for fluctuations and noise in computer simulation of plasma. *Physics of Fluids*, 22(1):163, 1979. ISSN 00319171. doi:10.1063/1.862452.

- A. Bruce Langdon. Evolution of Particle-in-Cell Plasma Simulation. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 42(5):1317–1320, 2014. ISSN 0093-3813, 1939-9375. doi:10.1109/TPS.2014.2314615.
- I. Langmuir. Oscillations in Ionized Gases. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 14(8):627–637, 1928. ISSN 0027-8424, 1091-6490. doi:10.1073/pnas.14.8.627.
- Sanjiva K. Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103(1):16–42, 1992. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(92)90324-R.
- Randall J. LeVeque. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser Basel, Basel, 1992. ISBN 978-3-7643-2723-1 978-3-0348-8629-1.
- Randall J. LeVeque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002. ISBN 978-0-511-79125-3.
- Denis Lorenzon y Sergio Elaskar. 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. *Mecánica Computacional*, XXXVII(26):1103–1117, 2019. ISSN 2591-3522.
- Denis Lorenzon y Sergio Elaskar. Using linear multistep methods for the time stepping in Vlasov–Poisson simulations. *Computational and Applied Mathematics*, 40(8):289, 2021. ISSN 2238-3603, 1807-0302. doi:10.1007/s40314-021-01683-4. URL <https://link.springer.com/10.1007/s40314-021-01683-4>.
- Denis Lorenzon, Sergio Elaskar, y Gonzalo Sánchez-Arriaga. Estudio de la Recolección Corriente en una Sonda de Langmuir Cilíndrica mediante un Código de Vlasov. En *4to Congreso Argentino de Ingeniería Aeronáutica (CAIA 4)*. Instituto Universitario Aeronáutico - Córdoba, Argentina, 2016a.
- Denis Lorenzon, Sergio Elaskar, y Gonzalo Sánchez-Arriaga. Simulación Numérica de la Recolección de Corriente en una Sonda de Langmuir Cilíndrica. *Mecánica Computacional*, XXXIV(53):3521 – 3535, 2016b. ISSN 2591-3522.
- Denis Lorenzon y Sergio A. Elaskar. Comparación de esquemas basados en diferencias finitas, volúmenes finitos y semi-Lagrangianos para la solución del sistema Vlasov-Poisson. En *2020 IEEE Congreso Bienal de Argentina (ARGENCON)*, págs. 1–8. IEEE, Resistencia, Argentina, 2020. ISBN 978-1-72815-957-7. doi:10.1109/ARGENCON49523.2020.9505417. URL <https://ieeexplore.ieee.org/document/9505417/>.

- Denis Lorenzon, Sergio A. Elaskar, y Andrés M. Cimino. Numerical Simulations Using Eulerian Schemes for the Vlasov–Poisson Model. *International Journal of Computational Methods*, 18(09):2150031, 2021. ISSN 0219-8762, 1793-6969. doi:10.1142/S0219876221500316. URL <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0219876221500316>.
- A. Mangeney, F. Califano, C. Cavazzoni, y P. Travnicek. A Numerical Scheme for the Integration of the Vlasov–Maxwell System of Equations. *Journal of Computational Physics*, 179(2):495–538, 2002. ISSN 00219991. doi:10.1006/jcph.2002.7071.
- Nader Masmoudi y Norbert J. Mauser. The Selfconsistent Pauli Equation. *Monatshefte für Mathematik*, 132(1):19–24, 2001. ISSN 0026-9255, 1436-5081. doi:10.1007/s006050170055.
- P. McCorquodale, M.R. Dorr, J.A.F. Hittinger, y P. Colella. High-order finite-volume methods for hyperbolic conservation laws on mapped multiblock grids. *Journal of Computational Physics*, 288:181–195, 2015. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2015.01.006.
- Gradimir V. Milovanović y Zlatko Udovičić. Calculation of coefficients of a cardinal B-spline. *Applied Mathematics Letters*, 23(11):1346–1350, 2010. ISSN 08939659. doi:10.1016/j.aml.2010.06.029.
- H. M. Mott-Smith y Irving Langmuir. The Theory of Collectors in Gaseous Discharges. *Physical Review*, 28(4):727–763, 1926. ISSN 0031-899X. doi:10.1103/PhysRev.28.727.
- Takashi Nakamura y Takashi Yabe. Cubic interpolated propagation scheme for solving the hyper-dimensional Vlasov–Poisson equation in phase space. *Computer Physics Communications*, 120(2-3):122–154, 1999. ISSN 00104655. doi:10.1016/S0010-4655(99)00247-7.
- W. M. Nevins, G. W. Hammett, A. M. Dimits, W. Dorland, y D. E. Shumaker. Discrete particle noise in particle-in-cell simulations of plasma microturbulence. *Physics of Plasmas*, 12(12):122305, 2005. ISSN 1070-664X, 1089-7674. doi:10.1063/1.2118729.
- Dwight R. Nicholson. *Introduction to plasma theory*. Krieger Pub. Co, Malabar, Fla, 1992. ISBN 978-0-89464-677-5.
- R. K Pathria y Paul D Beale. *Statistical Mechanics*. Elsevier Science & Technology Books, Jordan Hill, England, 2011. ISBN 978-0-12-382189-8.
- William H. Press, ed. *Numerical recipes: the art of scientific computing*. Cambridge University Press, Cambridge, UK ; New York, 3rd ed ed^{án}, 2007. ISBN 978-0-521-88068-8 978-0-521-88407-5 978-0-521-70685-8.

- Jing-Mei Qiu y Andrew Christlieb. A conservative high order semi-Lagrangian WENO method for the Vlasov equation. *Journal of Computational Physics*, 229(4):1130–1149, 2010. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2009.10.016.
- Jing-Mei Qiu y Chi-Wang Shu. Conservative high order semi-Lagrangian finite difference WENO methods for advection in incompressible flow. *Journal of Computational Physics*, 230(4):863–889, 2011. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2010.04.037.
- J. R. Sanmartin y R. D. Estes. The orbital-motion-limited regime of cylindrical Langmuir probes. *Physics of Plasmas*, 6(1):395–405, 1999. ISSN 1070-664X, 1089-7674. doi:10.1063/1.873293.
- J. R. Sanmartin, M. Martinez-Sanchez, y E. Ahedo. Bare wire anodes for electrodynamic tethers. *Journal of Propulsion and Power*, 9(3):353–360, 1993. doi:10.2514/3.23629.
- H. Schmitz y R. Grauer. Darwin–Vlasov simulations of magnetised plasmas. *Journal of Computational Physics*, 214(2):738–756, 2006. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2005.10.013.
- E. M. Shakhov. Boltzmann equation and moment equations in curvilinear coordinates. *Fluid Dynamics*, 2(2):107–109, 1971. ISSN 0015-4628, 1573-8507. doi:10.1007/BF01015156.
- M Shoucri, H Gerhauser, y K.-H Finken. Integration of the Vlasov equation along characteristics in one and two dimensions. *Computer Physics Communications*, 154(1):65–75, 2003. ISSN 00104655. doi:10.1016/S0010-4655(03)00281-9.
- M. Shoucri, H. Gerhauser, y K.-H. Finken. Study of the generation of a charge separation and electric field at a plasma edge using Eulerian Vlasov codes in cylindrical geometry. *Computer Physics Communications*, 164(1-3):138–149, 2004. ISSN 00104655. doi:10.1016/j.cpc.2004.06.022.
- Chi-Wang Shu. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. En Alfio Quarteroni, ed., *Advanced Numerical Approximation of Nonlinear Hyperbolic Equations*, tomo 1697, págs. 325–432. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1998. ISBN 978-3-540-64977-9 978-3-540-49804-9.
- Chi-Wang Shu. High-order Finite Difference and Finite Volume WENO Schemes and Discontinuous Galerkin Methods for CFD. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 17(2):107–118, 2003. ISSN 1061-8562, 1029-0257. doi:10.1080/1061856031000104851.

- N.J. Sircombe y T.D. Arber. VALIS: A split-conservative scheme for the relativistic 2D Vlasov–Maxwell system. *Journal of Computational Physics*, 228(13):4773–4788, 2009. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2009.03.029.
- Yoshio Sone. *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2002. ISBN 978-1-4612-6594-8 978-1-4612-0061-1.
- Eric Sonnendrücker, Jean Roche, Pierre Bertrand, y Alain Ghizzo. 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.
- Murray R. Spiegel. *Schaum’s outline of theory and problems of vector analysis and an introduction to tensor analysis*. Schaum’s outline series. McGraw-Hill, New York, 2002. ISBN 978-0-07-060228-1.
- Gilbert Strang. On the Construction and Comparison of Difference Schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3):506–517, 1968. ISSN 0036-1429, 1095-7170. doi:10.1137/0705041.
- D. G. Swanson. *Plasma waves*. Series in plasma physics. Institute of Physics Pub, Bristol ; Philadelphia, 2nd ed ed^{ón}., 2003. ISBN 978-0-7503-0927-1.
- G. Sánchez-Arriaga. A direct Vlasov code to study the non-stationary current collection by a cylindrical Langmuir probe. *Physics of Plasmas*, 20(1):013504, 2013. ISSN 1070-664X, 1089-7674. doi:10.1063/1.4774398.
- G. Sánchez-Arriaga y D. Pastor-Moreno. Direct Vlasov simulations of electron-attracting cylindrical Langmuir probes in flowing plasmas. *Physics of Plasmas*, 21(7):073504, 2014. ISSN 1070-664X, 1089-7674. doi:10.1063/1.4889732.
- Eleuterio F. Toro. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009. ISBN 978-3-540-25202-3 978-3-540-49834-6.
- Takayuki Umeda. A conservative and non-oscillatory scheme for Vlasov code simulations. *Earth, Planets and Space*, 60(7):773–779, 2008. ISSN 1880-5981. doi:10.1186/BF03352826.
- Takayuki Umeda, Maha Ashour-Abdalla, y David Schriver. 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.

- Takayuki Umeda, Yasuhiro Nariyuki, y Daichi Kariya. A non-oscillatory and conservative semi-Lagrangian scheme with fourth-degree polynomial interpolation for solving the Vlasov equation. *Computer Physics Communications*, 183(5):1094–1100, 2012. ISSN 00104655. doi:10.1016/j.cpc.2012.01.011.
- Francesco Valentini, Pierluigi Veltri, y André Mangeney. A numerical scheme for the integration of the Vlasov–Poisson system of equations, in the magnetized case. *Journal of Computational Physics*, 210(2):730–751, 2005. ISSN 00219991. doi:10.1016/j.jcp.2005.05.014.
- Victor Vedenyapin, Alexander Sinitzyn, y Eugene Dulov. *Kinetic Boltzmann, Vlasov and related equations*. Elsevier Science, Waltham, MA, 1st ed ed^{ón}, 2011. ISBN 978-0-12-387779-6.
- J P Verboncoeur. Particle simulation of plasmas: review and advances. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, 47(5A):A231–A260, 2005. ISSN 0741-3335, 1361-6587. doi:10.1088/0741-3335/47/5A/017.
- Marcel Vinokur. Conservation equations of gasdynamics in curvilinear coordinate systems. *Journal of Computational Physics*, 14(2):105–125, 1974. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(74)90008-4.
- G.V. Vogman, U. Shumlak, y P. Colella. 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.
- Zhijiang Wang, Kaili Wang, y Shujiang An. Cubic B-Spline Interpolation and Realization. En *Information Computing and Applications*, tomo 243, págs. 82–89. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2011. ISBN 978-3-642-27502-9 978-3-642-27503-6.
- Haruo Yoshida. Construction of higher order symplectic integrators. *Physics Letters A*, 150(5-7):262–268, 1990. ISSN 03759601. doi:10.1016/0375-9601(90)90092-3.
- S.I Zaki, L.R.T Gardner, y T.J.M Boyd. A finite element code for the simulation of one-dimensional vlasov plasmas. I. Theory. *Journal of Computational Physics*, 79(1):184–199, 1988. ISSN 00219991. doi:10.1016/0021-9991(88)90010-1.