

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA RECOLECCIÓN DE CORRIENTE EN UNA SONDA DE LANGMUIR CILÍNDRICA

Denis Lorenzon ^a, Sergio A. Elaskar ^{a,b} y Gonzalo Sánchez-Arriaga ^c

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

^b *Departamento de Aeronáutica, FCFyN, Universidad Nacional de Córdoba, Av. Vélez Sarsfield 1611, 5000 Córdoba, Argentina, <http://www.portal.efn.uncor.edu/>*

^c *Bioengineering and Aerospace Engineering Department, Universidad Carlos III de Madrid, Leganés, España, <http://www.uc3m.es/Inicio>*

Palabras Clave: Sonda de Langmuir, plasma, simulación numérica, código de Vlasov.

Resumen. En este artículo se presenta una adaptación del código Kilaps desarrollado originalmente en la Universidad Politécnica de Madrid. El objetivo del código es simular la dinámica de plasmas en las inmediaciones de una sonda de Langmuir cilíndrica cuyo potencial eléctrico es cambiado repentinamente desde cero hasta un valor finito. Las sondas de Langmuir son utilizadas para caracterizar las propiedades de plasmas y su adecuado modelado tanto teórico como numérico es de fundamental importancia para correlacionar las mediciones de una sonda con las propiedades del plasma. Dentro de las aplicaciones en ingeniería aeroespacial, los avances en teoría de sondas de Langmuir son utilizados en amarras espaciales electrodinámicas y en propulsores por plasma. El código desarrollado utiliza un algoritmo numérico de tipo Vlasov directo para propagar en el tiempo la ecuación de Vlasov dependiente del tiempo. Implementa fórmulas basadas en diferencias finitas para aproximar las derivadas de la función de distribución en el espacio físico y en el de velocidades, y la integración en el tiempo se lleva a cabo mediante un método de Runge-Kutta explícito. Como resultados se presentan diagramas de la variación de las propiedades del plasma en las inmediaciones de la sonda y de su evolución en el tiempo. Para justificar la resolución de las mallas usadas, se contrastan resultados obtenidos con mallas de distintos grados de refinamiento analizando la convergencia de la solución al refinar sucesivamente la malla. Complementariamente, se compara el desempeño de dos compiladores de Fortran ampliamente utilizados y se realiza un estudio de la escalabilidad del programa al ser ejecutado en múltiples procesadores en sistemas de memoria compartida. Además, se discuten algunas potenciales vías de optimización. Finalmente, se evalúan posibles líneas de acción para mejorar la exactitud de los resultados y extender la aplicabilidad del programa.

1 INTRODUCCIÓN

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), el diseño de amarras espaciales electrodinámicas (Sanmartín et al., 1993) o la implantación de iones fuente (Conrad, 1987). 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 (Mandell et al., 2006; Roussel et al., 2008). Estos códigos usan métodos de partículas en celdas (PIC) para resolver el sistema de Vlasov-Poisson y encontrar soluciones estacionarias al problema de la carga. Aquí se implementa un código de Vlasov Euleriano para encontrar soluciones inestacionarias al sistema de Vlasov-Poisson en un dominio con geometría cilíndrica.

Los primeros trabajos sobre la recolección de corriente en sondas de Langmuir asumían condiciones estacionarias (Bernstein y Rabinowitz, 1959; Laframboise, 1966; Sanmartín y Estes, 1999) y, como consecuencia de esto, despreciaban la población de partículas atrapadas en trayectorias cerradas. El cómputo de las partículas atrapadas requiere la solución de la ecuación de Vlasov no estacionaria. En el código presentado aquí, se considera que inicialmente el plasma y la sonda están en equilibrio, entonces el potencial de la sonda se cambia repentinamente de cero a 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), el cual se explica diciendo que la aparición repentina del potencial eléctrico atrapa los iones de baja cantidad de movimiento angular en las cercanías de la sonda (Sanmartín, 1972). 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; Onishi, 2002; Iza y Lee, 2006), como códigos de Vlasov Eulerianos usando coordenadas cartesianas (García y Goedert, 1999) y cilíndricas (Shoucri et al., 2004).

El programa Kilaps desarrollado en la Universidad Politécnica de Madrid representa un código original que en lugar de usar métodos tipo PIC, implementa un código de Vlasov directo para resolver el sistema Vlasov-Poisson no estacionario en una geometría cilíndrica (Sánchez-Arriaga, 2013; Sánchez-Arriaga y Pastor-Moreno, 2014). La diferencia entre ambas metodologías es que un código tipo PIC discretiza la ecuación de Vlasov usando macropartículas, cada una de las cuales representa numerosas partículas reales, y sus trayectorias son seguidas usando un método de características. En contraste, un código de Vlasov directo discretiza la función de distribución en el espacio físico y de velocidades.

Los códigos de Vlasov directos tienen significativas ventajas por sobre los PIC. Por ejemplo, un código tipo PIC no da resultados precisos cuando el número de partículas por celda es pequeño, y además, introduce un ruido numérico en las simulaciones que crece en la medida que aumenta $1/\sqrt{N}$ (donde N es el número de partículas). Este ruido fue puesto en evidencia en Calder y Laframboise, (1990) y en Iza y Lee, (2006). Por su parte, los códigos de tipo Vlasov directo requieren más recursos computacionales en términos de memoria y potencia de cálculo pero están libres de los problemas mencionados.

El presente trabajo es solamente la primera instancia de un proceso de adaptación, optimización y extensión del programa Kilaps. Hasta ahora el código se ha reorganizado y adaptado para ser compilado y ejecutado sobre la plataforma Windows, para lo cual fue reescrito en la IDE Microsoft® Visual Studio 2015 y compilado con el compilador Intel® Fortran Compiler 16.0. Entre las optimizaciones preliminares realizadas se destacan opciones de compilación, modificaciones clásicas en el código y asistencia a la auto-vectorización de los lazos. El principal objetivo a futuro será la incorporación al programa de las ecuaciones

electrodinámicas para resolver el sistema Vlasov-Maxwell en lugar del sistema Vlasov-Poisson.

El trabajo aquí presentado se organiza como sigue. En la Sección II se introducen el modelo matemático y el algoritmo numérico para resolver las ecuaciones. También se describe la adaptación realizada del programa Kilaps para la Universidad Nacional de Córdoba. La Sección III muestra algunos resultados obtenidos y las conclusiones se exponen en la Sección IV.

2 EL MODELO

2.1 Ecuaciones relevantes

Se considera un plasma Maxwelliano ideal en reposo, no colisional y no magnetizado, compuesto por electrones e iones con temperaturas T_e y T_i , respectivamente, y una densidad sin perturbar N_0 . Inicialmente, el plasma está en equilibrio con una sonda cilíndrica perfectamente absorbente de radio R 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.

Con el propósito de estudiar el transitorio, se introducen las siguientes variables adimensionales

$$\begin{aligned} \omega_{pe} t \rightarrow t, \quad \frac{r}{\lambda_{De}} \rightarrow r, \quad \frac{v}{\sqrt{k_B T_e / m_e}} \rightarrow v, \\ \frac{e\varphi}{k_B T_e} \rightarrow \varphi, \quad \frac{k_B T_e f_\alpha}{N_0 m_e} \rightarrow f_\alpha, \quad \frac{N_\alpha}{N_0} \rightarrow N_\alpha \end{aligned} \quad (1)$$

y parámetros adimensionales

$$\mu_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_e}, \quad \epsilon_\alpha = \frac{q_\alpha}{e}, \quad \delta_\alpha = \frac{T_\alpha}{T_e}, \quad \rho = \frac{R}{\lambda_{De}} \quad (2)$$

donde $\alpha = i, e$ denota iones y electrones, respectivamente.

Bajo las suposiciones de que el plasma es no colisional ($df_\alpha/dt = 0$), no relativista ($v \ll c$), y de que no hay efectos magnéticos ($v \times B \ll E$ y $\partial B/\partial t \cong 0$), el sistema de Vlasov-Poisson es

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial x} + \frac{dv}{dt} \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial v} = 0 \quad (3)$$

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{e}{\epsilon_0} (N_i - N_e) \quad (4)$$

Si se usa un sistema de coordenadas cilíndricas con origen en el centro de la sonda y se consideran dos dimensiones en el espacio físico (r, θ) más dos dimensiones en el espacio de velocidades (v_r, v_θ), el sistema se escribe

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + v_r \frac{\partial f_\alpha}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \theta} + \left(\frac{v_\theta^2}{r} - \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_r} - \frac{1}{r} \left(v_r v_\theta + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \right) \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_\theta} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} = \frac{e}{\epsilon_0} (N_e - N_i) \quad (6)$$

Si, además, se supone que la función de distribución y el potencial tienen simetría cilíndrica respecto del eje de la sonda, las ecuaciones adimensionales se reducen a

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + v_r \frac{\partial f_\alpha}{\partial r} + \left(\frac{v_\theta^2}{r} - \frac{\epsilon_\alpha}{\mu_\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{r} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_\theta} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) = N_e - N_i \quad (8)$$

donde las densidades de carga N_α se obtienen por integración de las funciones de distribución en el espacio de velocidades

$$N_\alpha(r, t) = \iint f_\alpha(r, v_r, v_\theta, t) dv_r dv_\theta \quad (9)$$

Este sistema de ecuaciones (Ecs. 7-9) debe integrarse con las siguientes condiciones de contorno

$$f_\alpha(\rho, v_r > 0, v_\theta, t) = 0 \quad (10)$$

$$\varphi(\rho, t) = \varphi_p \quad (11)$$

$$f_\alpha(r \rightarrow \infty, v_r, v_\theta, t) \rightarrow f_{0\alpha} = \frac{\mu_\alpha}{2\pi\delta_\alpha} e^{-\frac{\mu_\alpha}{2\delta_\alpha}(v_r^2 + v_\theta^2)} \quad (12)$$

$$\varphi(r \rightarrow \infty, t) \rightarrow 0 \quad (13)$$

donde la función de distribución se anula sobre la superficie de la sonda si la velocidad radial es positiva ya que la sonda no emite partículas.

Para la situación inicial, se usa la siguiente función de distribución

$$f_\alpha(r, v_r, v_\theta, 0^-) = f_{0\alpha} \quad \text{si} \quad \left| \arctan\left(\frac{v_\theta}{v_r}\right) \right| \geq \arcsin\left(\frac{\rho}{r}\right) \quad (14)$$

$$f_\alpha(r, v_r, v_\theta, 0^-) = 0 \quad \text{si} \quad \left| \arctan\left(\frac{v_\theta}{v_r}\right) \right| < \arcsin\left(\frac{\rho}{r}\right) \quad (15)$$

Dado que la sonda no emite partículas y que la función de distribución se conserva a lo largo de las órbitas de las partículas, se tiene que $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = 0$ si la órbita de una partícula seguida hacia atrás en el tiempo desemboca en la sonda, si esto no ocurre, la función de distribución es una de Maxwell-Boltzmann. Por esta razón, aunque inicialmente la sonda no está polarizada y el potencial es cero en todo lugar, la presencia de la sonda modifica la función de distribución Maxwelliana del plasma sin perturbar. Para cada valor de r , la función de distribución es una de Maxwell en todo punto del espacio de fases excepto en un cono en el plano $v_r - v_\theta$. El ángulo de este cono depende del valor de r , variando desde π cuando $r = \rho$ hasta 0 cuando $r \rightarrow \infty$.

La primera vez que se aplicaron las condiciones de contorno dadas por las ecuaciones (14) y (15) para simulaciones numéricas de la recolección de corriente en sondas cilíndricas fue en el trabajo de Sánchez-Arriaga, (2013). Se destaca que inicializar el código con una distribución Maxwelliana simple genera una inconsistencia en la condición de contorno en $r = \rho$ (Ec. 10). Esta inconsistencia no es importante en las simulaciones tipo PIC pero en los códigos de Vlasov podría introducir fuertes gradientes en las cercanías de la sonda los cuales no tienen ningún sentido físico.

2.2 Implementación numérica

Siguiendo con la línea de desarrollo del programa Kilaps (Sánchez-Arriaga, 2013; Sánchez-Arriaga y Pastor-Moreno, 2014), el código presentado discretiza el espacio $r - v_r - v_\theta$ con mallas que pueden ser diferentes para los iones y electrones. El dominio espacial infinito $r \in [\rho, \infty)$ es limitado a un radio r_{max} , y el intervalo $[\rho, r_{max}]$ es discretizado con N_r puntos que pueden no estar distribuidos uniformemente. Respecto del espacio de velocidades, los dominios infinitos son limitados a intervalos finitos $v_r \in [-v_{rmax}, v_{rmax}]$ y $v_\theta \in [-v_{\theta max}, v_{\theta max}]$. Estos intervalos se discretizan con N_{v_r} y N_{v_θ} puntos, respectivamente, igualmente espaciados. Como consecuencia de la diferencia entre la masa de los iones y la de los electrones, los valores de v_{rmax} y de $v_{\theta max}$ se toman diferentes para cada especie.

Por lo tanto, los iones y electrones tienen mallas distintas en el espacio de velocidades pero comparten los mismos nodos en la dirección radial. En la posición $r = \rho$ donde $f_\alpha = 0$ si $v_r > 0$, no es necesario incluir nodos con velocidad radial positiva por lo que se usan $(N_{v_r} + 1)/2$ puntos para discretizar el intervalo $[-v_{r_{max}}, 0]$. El número total de nodos, tanto para los iones como para los electrones, está dado por

$$N = N_{v_\theta} \left[\frac{N_{v_r} + 1}{2} + N_{v_r} (N_r - 1) \right] = N_{v_\theta} N_{v_r} N_r - \frac{N_{v_\theta} (N_{v_r} - 1)}{2} \quad (16)$$

En cada uno de los N puntos de la malla dado por las coordenadas $(r_i, v_{r_j}, v_{\theta_k})$, está definido el valor de la función de distribución $f^\alpha_{i,j,k}(t)$, de la especie α .

A continuación, se emplean fórmulas de diferencias finitas para transformar la ecuación de Vlasov en un conjunto de $2N$ ecuaciones diferenciales ordinarias con las incógnitas $f^\alpha_{i,j,k}(t)$. Este proceso de discretización debe preservar el carácter hiperbólico de la ecuación de Vlasov por lo que se requiere una correcta implementación de los esquemas hacia atrás y hacia adelante. Por ejemplo, el término $v_r \partial f_\alpha / \partial r$ en la (Ec. 3) se aproxima mediante las siguientes fórmulas de diferencias finitas de primer orden

$$v_{r_j} \frac{\partial f}{\partial r} \Big|_{i,j,k} \cong v_{r_j} \frac{f_{i,j,k} - f_{i-1,j,k}}{r_i - r_{i-1}} \quad \text{si } v_{r_j} \geq 0 \quad (17)$$

$$v_{r_j} \frac{\partial f}{\partial r} \Big|_{i,j,k} \cong v_{r_j} \frac{f_{i+1,j,k} - f_{i,j,k}}{r_{i+1} - r_i} \quad \text{si } v_{r_j} < 0 \quad (18)$$

Los términos que incluyen $\partial f_\alpha / \partial v_r$ y $\partial f_\alpha / \partial v_\theta$ en la ecuación (7) son discretizados de una manera similar solo que usando fórmulas de diferencias finitas de segundo orden. Debe ponerse especial cuidado a la discretización del término que incluye el potencial ya que el signo de la derivada radial del potencial puede variar a lo largo de la simulación. En cada paso de tiempo, se controla este signo en cada punto de la malla con el objetivo de implementar la fórmula correcta para $\partial f_\alpha / \partial v_r$.

En los contornos del dominio numérico, las fórmulas de diferencias finitas implican conocer el valor de la función de distribución fuera de la malla, por ello, son usadas las condiciones de contorno (Ecs. 10 y 12). El código asume que los valores de $v_{r_{max}}$ y de $v_{\theta_{max}}$ son lo suficientemente altos como para despreciar la función de distribución si v_r o v_θ no caen dentro de los intervalos considerados. Sobre la superficie de la sonda $r = \rho$, no es necesario aplicar ninguna condición de contorno para $v_r < 0$ porque las fórmulas de diferencias finitas hacia adelante no precisan ningún valor fuera del dominio. Cabe mencionar que si $r = \rho$ y $v_r > 0$, no se calcula la derivada de la función de distribución en la dirección radial dado que la sonda se considera perfectamente absorbente (Ec. 10).

La aplicación de las fórmulas de diferencias finitas en el otro contorno espacial $r = r_{max}$ cuando $v_r < 0$ es un poco más complicada a causa de que necesita valores de la función de distribución fuera del dominio computacional. En cualquier posición $r > r_{max}$, el algoritmo define a la función de distribución de la misma forma que las ecuaciones (14 y 15), lo cual tiende a ser exacto (Ec. 12) en la medida que r_{max} tiende a infinito. No obstante, como r_{max} es finito, el potencial tiene un valor residual en r_{max} que hace que la función de distribución se distinga de una Maxwelliana. Como consecuencia, se encuentra una pequeña separación de las cargas en las posiciones cercanas al borde $r = r_{max}$. Este error puede reducirse simplemente aumentando el valor del parámetro r_{max} aunque esto también aumenta el tiempo de cálculo si se desea mantener la resolución de la malla.

Por conveniencia, todas las incógnitas $f^{\alpha}_{i,j,k}(t)$ se disponen en un único arreglo unidimensional \mathbf{F}_{α} de dimensión N . Luego, la ecuación de Vlasov para los electrones se escribe

$$\frac{d\mathbf{F}^e}{dt} = \left[\mathbf{M}^e_L + \frac{\epsilon_e}{\mu_e} \mathbf{M}^e_{NL}(\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^i) \right] \mathbf{F}^e + \mathbf{C}^e \quad (19)$$

La expresión para los iones es análoga a la anterior. La matriz dispersa \mathbf{M}^{α}_L contiene toda la información relacionada con la parte lineal de la ecuación de Vlasov mientras que el vector \mathbf{C}^{α} tiene en cuenta la condición de contorno en $r = r_{max}$. Dado que \mathbf{M}^{α}_L y \mathbf{C}^{α} solo dependen de factores geométricos y de las condiciones de contorno, respectivamente, estos son calculados una sola vez al principio de la simulación. La matriz \mathbf{M}^{α}_{NL} contempla los términos no lineales de la ecuación de Vlasov y es calculada junto con el potencial φ en cada paso de tiempo.

El potencial se encuentra computando los vectores de densidad \mathbf{N}_e y \mathbf{N}_i , ambos de dimensión N_r , a partir de los valores de la función de distribución en los puntos de la malla. La integración doble en el espacio de velocidades se lleva a cabo usando la regla de Simpson. Una vez conocidas las densidades, se resuelve la ecuación de Poisson (Ec. 8) usando un solver de elementos finitos (presentado en Choiniere, 2004). Si se asume una distribución lineal por partes del potencial y la carga, el vector Φ con los valores del potencial en cada punto de la malla se computa a partir de

$$\Phi = \mathbf{J}(\mathbf{N}_i - \mathbf{N}_e) + \mathbf{V}_{est} \quad (20)$$

donde la matriz \mathbf{J} y el vector \mathbf{V}_{est} se calculan una vez generada la malla. Este método impone como condiciones de contorno $\varphi = \varphi_p$ en $r = \rho$ y un comportamiento asintótico $\varphi \propto 1/r$ en $r = r_{max}$ usado ampliamente en simulaciones numéricas (Bernstein y Rabinowitz, 1959; Laframboise, 1966; Sanmartín y Estes, 1999).

El sistema de $2N$ ecuaciones diferenciales ordinarias, compuesto por las Ecs. (19) y sus análogas para los iones, se integra a través de un algoritmo tipo Runge-Kutta explícito de tercer orden o un esquema de Euler implícito hacia atrás. El esquema implícito es estable clase A y el incremento de tiempo Δt no está condicionado por cuestiones de estabilidad. Esto es provechoso cuando el radio de la sonda es pequeño ya que el campo eléctrico es grande en las proximidades de la sonda y los métodos explícitos requieren Δt muy pequeños. La desventaja del método implícito es que necesita la resolución de un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales en cada paso de tiempo, lo cual es costoso computacionalmente.

El código almacena solamente en memoria los elementos no nulos de \mathbf{M}^{α}_L y \mathbf{M}^{α}_{NL} . Asimismo, emplea subrutinas especiales para las operaciones algebraicas con matrices dispersas. En el caso del esquema de integración implícito, el sistema de ecuaciones algebraicas no lineales se resuelve con un método de Newton que implica el cálculo del Jacobiano del sistema. Para que el costo computacional del programa no se dispare, se usa la matriz $\mathbf{M}^e_L + \epsilon_e \mathbf{M}^e_{NL}/\mu_e$ como aproximación para el Jacobiano, y esta matriz junto con su descomposición LU solo se calculan cuando el método de Newton no converge luego de un número razonable de iteraciones. Es de esperar que el Jacobiano y su factorización LU solo se computen pocas veces a lo largo de una simulación debido que, luego de los instantes iniciales, el potencial varía lentamente. Si bien el incremento de tiempo del esquema implícito no está limitado por la estabilidad, éste si está limitado por problemas de convergencia del método de Newton. De todos modos, el esquema implícito brinda en general una velocidad mucho mayor que el de Runge-Kutta explícito.

2.3 Adaptación del código

Teniendo en mente el objetivo de extender el programa Kilaps para resolver la ecuación de Vlasov junto con las ecuaciones de Maxwell, el código ha sido adaptado para ser compilado en la plataforma Windows® con el compilador Intel® Fortran Compiler. La elección del compilador se basa en que éste es reconocido como uno de los mejores compiladores de Fortran por generar ejecutables cuyo desempeño es superior a los generados por sus competidores (<http://www.fortran.uk/fortran-compiler-comparisons-2015/>; <https://software.intel.com/en-us/fortran-compilers/details>).

A partir de la simulación de casos de prueba, se comparó el desempeño (un desempeño mejor se refiere a tiempos menores de ejecución) del compilador Intel® Fortran Compiler 16.0 en Windows 10 usando las librerías MPI de Microsoft® y de Intel®, y del compilador GNU gFortran 6.2.0 en Ubuntu 14.04.4 usando las implementaciones MPICH 3.2 y Open MPI 2.0.1 (ver Figura 1). En todas las simulaciones de prueba, el compilador Intel proporcionó velocidades significativamente mayores que el GNU aunque esto puede deberse a la implementación de MPI ya que gran parte del tiempo de ejecución del programa está relacionado con la comunicación entre procesos.

Se desea que los tiempos de ejecución del programa sean los menores posibles por lo que se ha emprendido un proceso de optimización que incluye opciones de compilación, cambios en el código, vectorización y paralelismo con MPI más OpenMP. Este proceso se ha comenzado compilando los ejecutables con un nivel de optimización *O2* para favorecer la velocidad por sobre el número de instrucciones, forzando la expansión *inline* de funciones dentro de otras para disminuir la cantidad de llamadas, habilitando optimizaciones inter-procedurales y usando modelos rápidos para las operaciones de punto flotante que no respetan el estándar IEEE 754. Además, se especificó que se dispone de un procesador Intel® con conjuntos de instrucciones *AVX* para que el compilador vectorice automáticamente la mayor parte posible del programa.

Desde los archivos intermedios *assembly* generados se verifica que se incluyen instrucciones vectoriales *AVX* en la mayoría de las funciones, sin embargo, no se consiguen mejoras significativas en el desempeño por medio de la vectorización. Esto significa que existe un margen para seguir optimizando el programa favoreciendo la vectorización, modificando la estructura de datos, reduciendo la cantidad de operaciones en los lazos y haciendo más eficientes los accesos a memoria.

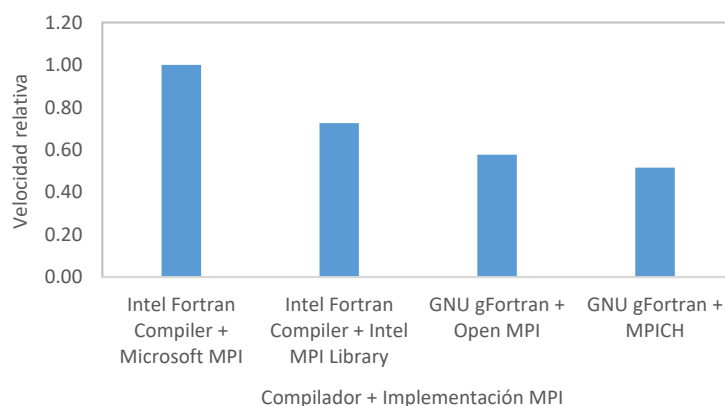


Figura 1: Comparación de la velocidad relativa de distintos compiladores e implementaciones de MPI. (Caso de prueba: $N_r = 237, N_{v_r} = N_{v_\theta} = 79, \omega_{pe}t = 2, \Delta t = 0.001$).

El código se encuentra paralelizado usando el estándar MPI (Message Passing Interface) y descomponiendo el dominio espacial de manera que cada hilo resuelva un subdominio del problema. Para caracterizar el aprovechamiento de la potencia de cálculo de varias unidades de procesamiento, se calcula la eficiencia del paralelismo. Esta se define para un número n de procesadores como la relación de velocidades de ejecución

$$\eta = \frac{vel^n_{CPUs}}{n vel^1_{CPU}} \quad (21)$$

La Figura 2 muestra los tiempos de cómputo para dos casos de prueba con tiempos totales de simulación $\omega_{pe} = 1$ y 2, indicando la eficiencia del paralelismo del programa al pasar de dos a cuatro procesadores.

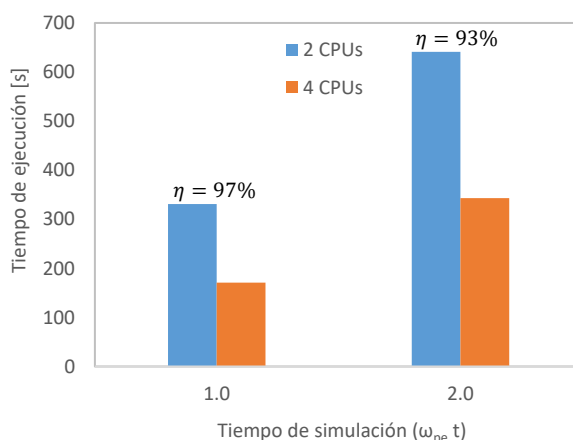


Figura 2: Tiempos de ejecución y eficiencia del paralelismo al pasar de dos a cuatros procesadores. (Caso de prueba: $N_r = 237, N_{v_r} = N_{v_\theta} = 79, \omega_{pe} t = 2, \Delta t = 0.001$).

En todas las simulaciones de prueba realizadas, la velocidad del programa aumenta de manera proporcional al número de unidades de procesamiento empleadas logrando una eficiencia del paralelismo superior al 90%. Por la forma en que está implementada la interfaz MPI, el programa sólo puede escalarse a cualquier número par de procesadores, por ello, se toman como referencia los tiempos obtenidos con dos procesadores para el cálculo de la eficiencia.

Si bien la eficiencia calculada es alta, se desconoce el desempeño del programa sin paralelismo de hilos y se planea modificar la implementación de MPI para que el programa sea paralelizable a un número cualquiera de procesos. Por otra parte, se desea evaluar la performance del código reemplazando MPI por OpenMP, o implementando OpenMP en las secciones secuenciales del programa.

3 RESULTADOS

Los parámetros físicos usados para todas las simulaciones presentadas son

$$\frac{e\phi_p}{k_B T_e} = 15, \quad \frac{T_i}{T_e} = 1, \quad \frac{m_i}{m_e} = 1836, \quad \frac{R}{\lambda_{De}} = 0.5 \quad (22)$$

Por su parte, los límites del dominio en el espacio físico y de velocidades son

$$\begin{aligned} r_{max} &= 100 \lambda_{De}, \quad v_{r_{max}} = v_{\theta_{max}} = 10 \sqrt{k_B T_e / m_e} \text{ (electrones)} \\ v_{r_{max}} &= v_{\theta_{max}} = 10 \sqrt{k_B T_e / m_e} \sqrt{m_e / m_i} \text{ (iones)} \end{aligned} \quad (23)$$

Una simulación de tiempo adimensional $\omega_{pe} t = 100$ fue realizada con tres mallas de distinta resolución para analizar la dependencia de la solución de la discretización y para definir una resolución adecuada para simular tiempos de hasta $\omega_{pe} t = 2000$. Los números de nodos de las tres mallas, llamadas *gruesa*, *media* y *fin*a, están dados por

$$\begin{aligned} \text{gruesa: } & N_r = 121, \quad N_{v_r} = N_{v_\theta} = 51, \quad N_{Hres} = 32 \\ \text{media: } & N_r = 185, \quad N_{v_r} = N_{v_\theta} = 75, \quad N_{Hres} = 48 \\ \text{fin: } & N_r = 281, \quad N_{v_r} = N_{v_\theta} = 99, \quad N_{Hres} = 96 \end{aligned} \quad (24)$$

La malla espacial no es uniforme sino que está refinada con N_{Hres} nodos en el intervalo desde la sonda hasta $r = 10 \lambda_{De}$ para capturar correctamente la dinámica del plasma cerca de la pared. Todos los resultados aquí mostrados fueron obtenidos con el esquema de integración explícito de Runge-Kutta aunque se destaca que el método implícito proporciona resultados similares.

La Figura 3 compara las distribuciones de electrones e iones obtenidas con las tres mallas para los instantes de tiempo $\omega_{pe} t = 5$ y 100 . Se observa que al refinar sucesivamente la malla, las curvas conservan la misma tendencia pero se desplazan hacia arriba y no queda claro si la solución obtenida con la malla *fin*a está próxima a la convergencia. La diferencia entre las funciones de distribución electrónica obtenidas con la malla *gruesa* y *fin*a en $\omega_{pe} t = 100$ sobre la pared de la sonda ($r = 0.5 \lambda_{De}$) y en el límite del dominio físico ($r = 100 \lambda_{De}$) es expuesta en la Figura 4.

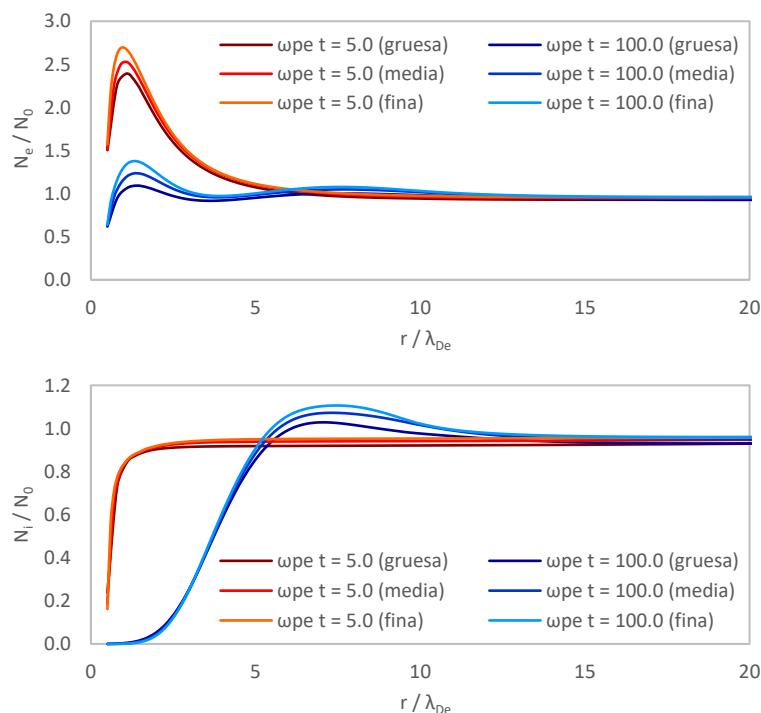


Figura 3: Distribuciones de electrones (arriba) e iones (abajo) obtenidas con mallas de distinta resolución en $\omega_{pe} t = 5$ y 100 .

La Figura 5 muestra la evolución temporal de la distribución de densidad de electrones en el intervalo de tiempo $\omega_{pe} t = 0 - 100$ lograda con la malla *fin*a, y detalla la variación espacial para algunos instantes de tiempo específicos. La evolución espacio-temporal de la densidad de

iones puede verse en la Figura 6. Se aprecia que al principio de la simulación los electrones son atraídos hacia la sonda produciendo un pico de densidad, aproximadamente de $N_e/N_0 = 2.70$ en $\omega_{pe}t = 5$, como respuesta al abrupto cambio en el potencial de la sonda. La densidad de iones, a su vez, exhibe un máximo por sobre la densidad de fondo durante el transitorio aproximadamente de $N_i/N_0 = 1.17$ en $\omega_{pe}t = 55$ (ver Figura 6, curvas $\omega_{pe}t = 20 - 100$).

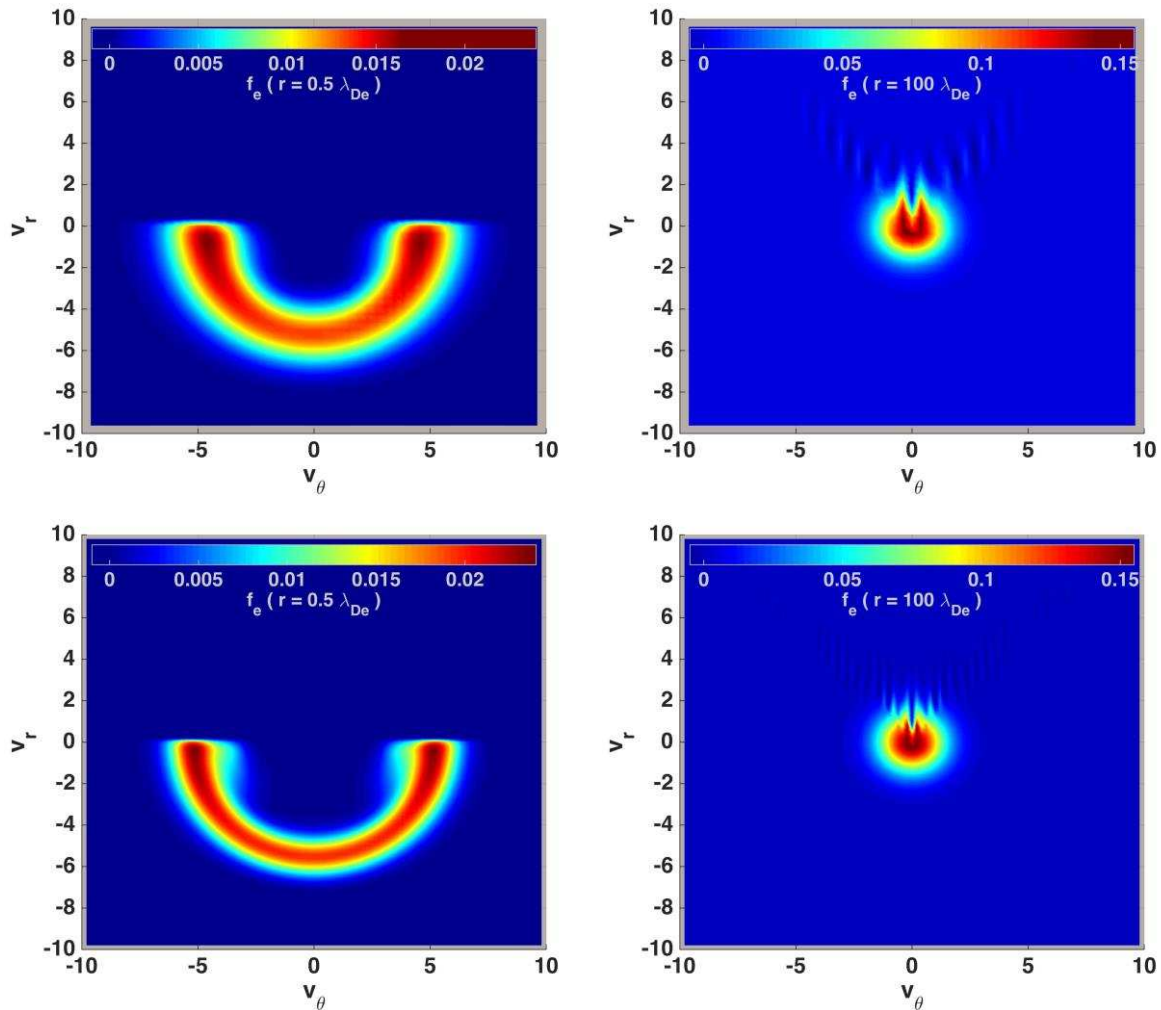


Figura 4: Funciones de distribución electrónica sobre la sonda y en $\omega_{pe}t = 100$ obtenidas con la malla *gruesa* (arriba) y *fina* (abajo).

Empleando una malla de resolución similar a la denominada *media* ($N_r = 185, N_v = 65$), se realizó una simulación de tiempo adimensional $\omega_{pe}t = 2000$. La función de distribución de electrones alcanzada al final de la simulación es representada en el espacio de velocidades en la Figura 7, en las posiciones $r = 0.5 \lambda_{De}$ (pared de la sonda), $r = 1.39 \lambda_{De}$ (donde la densidad de electrones es máxima), en $r = 10 \lambda_{De}$ y en $r = 100 \lambda_{De}$ (lejos de la sonda). Se observa que en $r = \rho$ no existen partículas con velocidad radial positiva lo cual es consistente con la suposición de una sonda perfectamente absorbente (condición de contorno Ec. 10). En la posición radial donde la densidad de electrones es máxima, la función de distribución adopta valores finitos para velocidades radiales positivas. En el límite exterior del dominio la función de distribución se aproxima a una de Maxwell-Boltzmann pero manteniéndose nula si $v_\theta = 0$ y $v_r > 0$, debido a la presencia de la sonda. Entre $r = 10 \lambda_{De}$ y $r = r_{max}$ aparecen pequeñas

fluctuaciones espurias en la función de distribución electrónica producidas por la combinación de la resolución de la malla con la transición discontinua dada por las ecuaciones (14 y 15). En la Figura 4 se aprecia que refinar la malla no reduce significativamente la amplitud ni la extensión de dichas fluctuaciones.

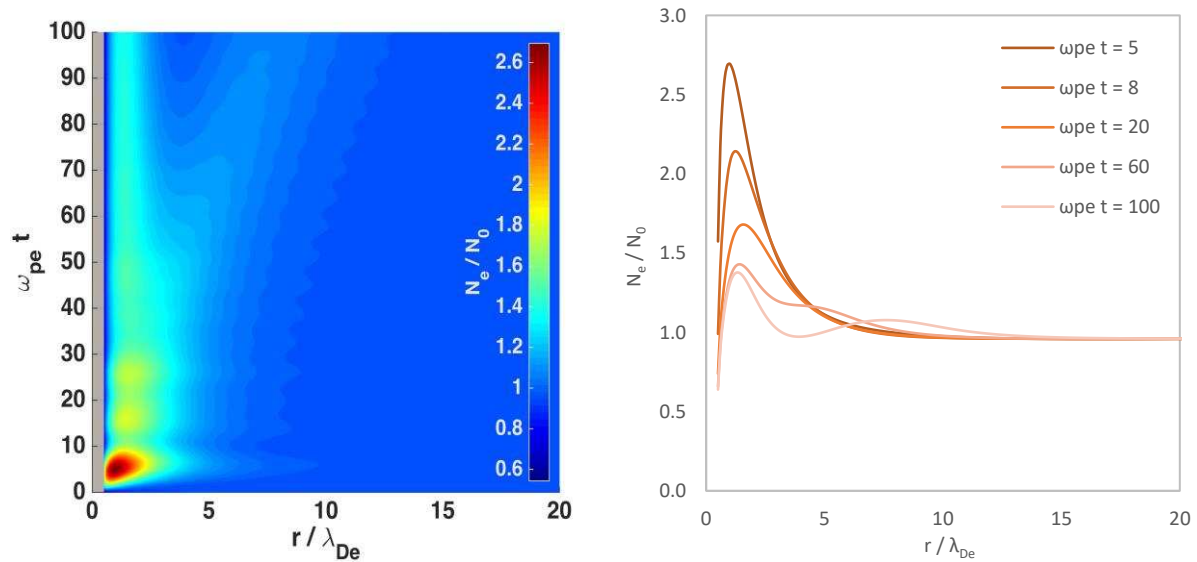


Figura 5: Evolución espacio-temporal de la densidad de electrones ($N_r = 281, N_v = 99$).

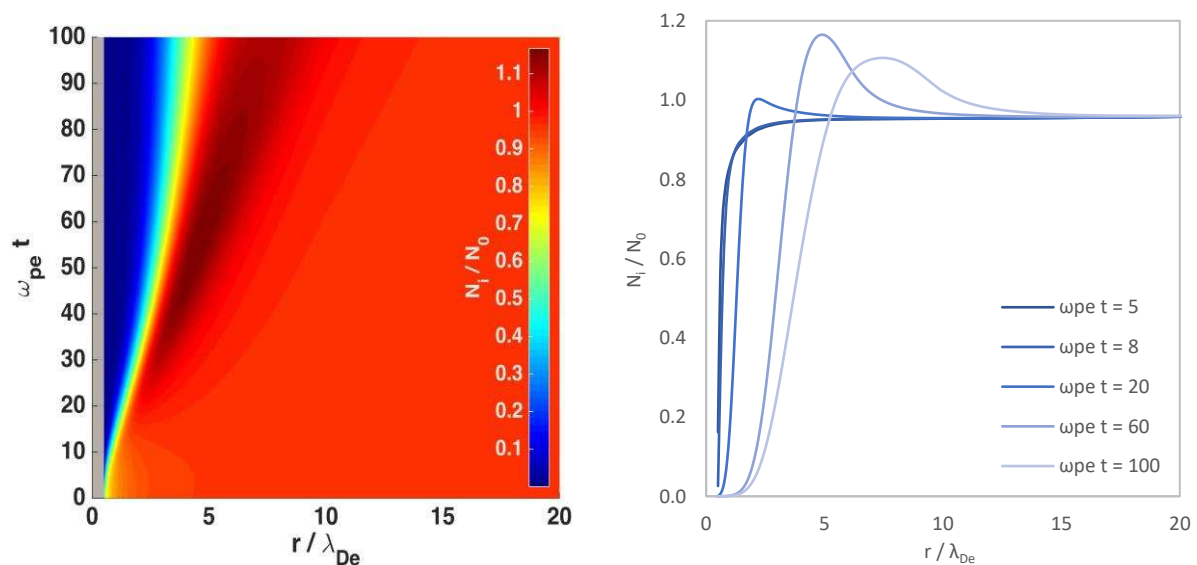


Figura 6: Evolución espacio-temporal de la densidad de iones ($N_r = 281, N_v = 99$).

Las distribuciones de densidad de electrones e iones alcanzadas al final de la simulación ($\omega_{pe}t = 2000$) se representan en la Figura 8. La Figura 9 muestra la evolución temporal de la densidad de electrones sobre la pared de la sonda y de la densidad de electrones máxima. La densidad electrónica normalizada sobre la sonda ($N_e^{r=\rho}/N_0$) se incrementa inicialmente por encima de la densidad de fondo (aproximadamente hasta $N_e^{r=\rho} = 1.68 N_0$ en $\omega_{pe}t = 3.5$) y luego decae aproximándose progresivamente a un valor ligeramente por encima de $0.55 N_0$. Por su parte, la densidad electrónica máxima normalizada también exhibe un sobrepaso de aproximadamente $2.70 N_0$ y se aproxima a N_0 al avanzar en el tiempo.

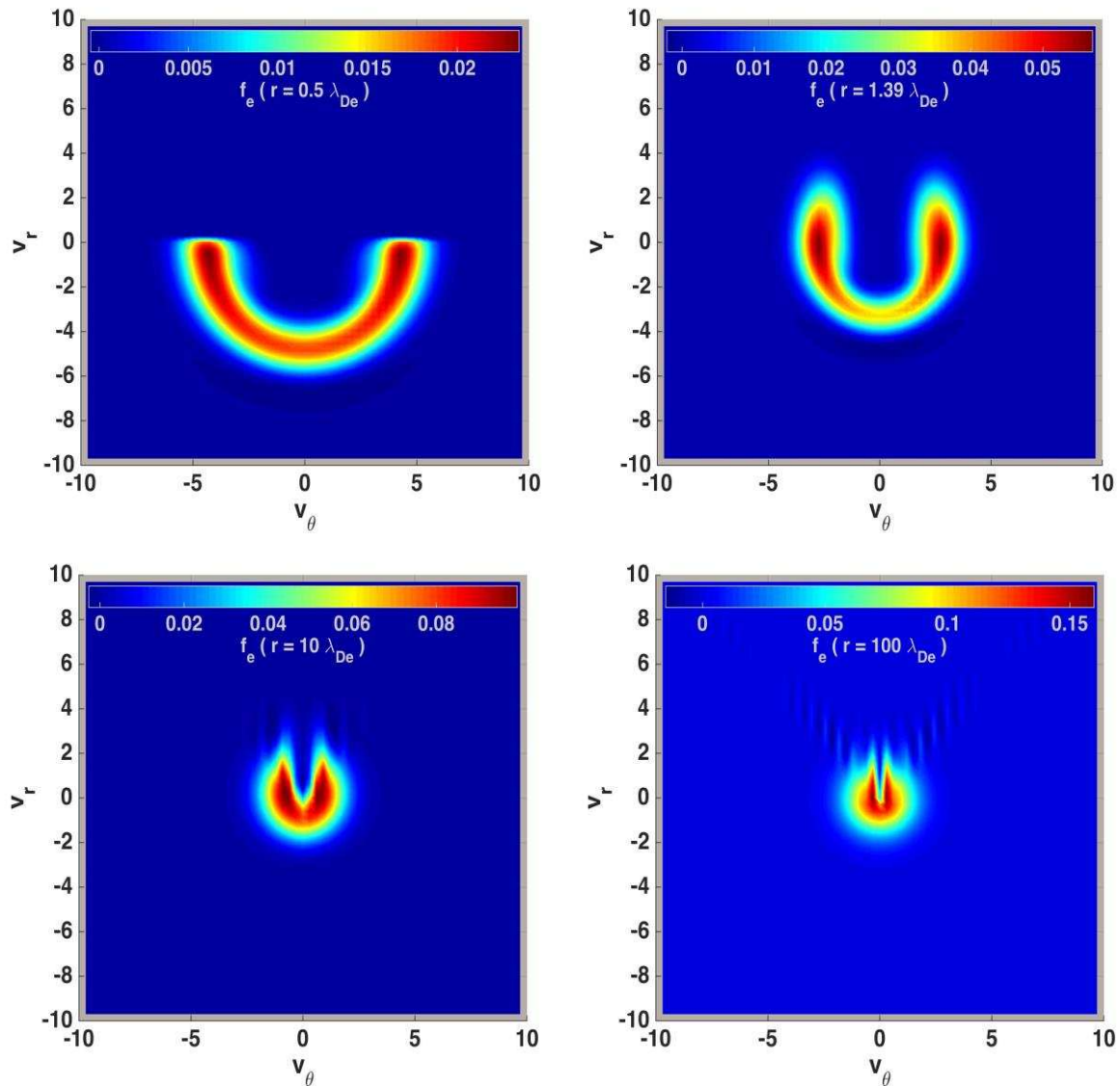


Figura 7: Funciones de distribución de electrones al final de la simulación
 ($\omega_{pe} t = 2000, N_r = 185, N_v = 65, N_{Hres} = 64$).

Además de las simulaciones cuyos resultados se presentan aquí, se realizaron numerosas otras con distintas resoluciones de las mallas, tamaños del dominio, potenciales de la sonda y radios de la sonda. Un problema significativo es que al disminuir ρ , Δr debe hacerse más pequeño con el objetivo de capturar correctamente la dinámica del plasma en las cercanías de la sonda. Como consecuencia, se requieren pasos de tiempo muy pequeños para conservar la estabilidad del esquema de integración explícito de Runge-Kutta.

Todas las simulaciones realizadas exhibieron un comportamiento similar que el mostrado en las Figuras 3-9, aún para potenciales de la sonda negativos. Si bien la respuesta es siempre oscilatoria amortiguada al principio para tender luego de un tiempo (aproximadamente $\omega_{pe} t = 500$) a un estado estacionario, se observa que al disminuir el radio de la sonda aumenta la frecuencia y el número de las oscilaciones.

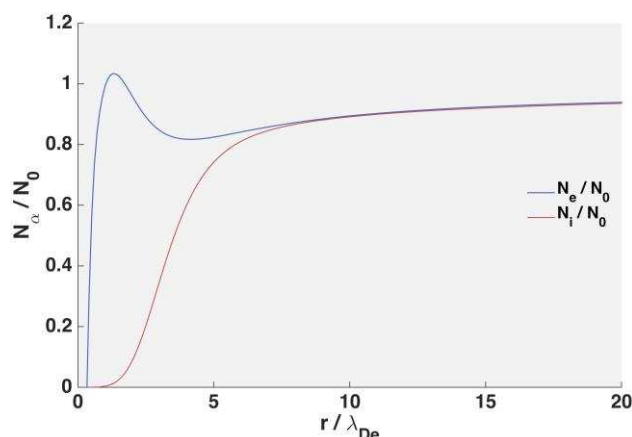


Figura 8: Distribución final de la densidad de electrones (curva azul) y de iones (curva roja) ($\omega_{pe} t = 2000, N_r = 185, N_v = 65, N_{Hres} = 64$).

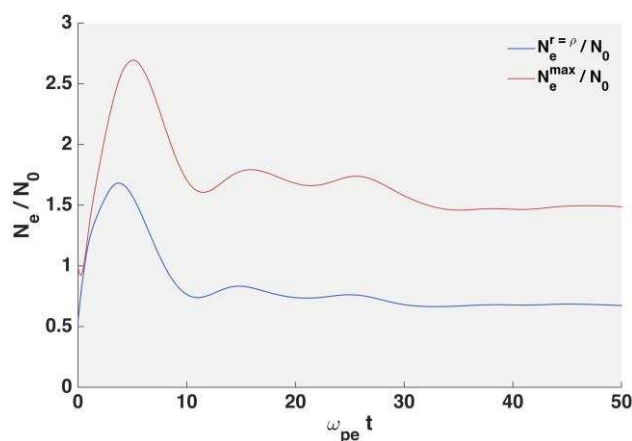


Figura 9: Evolución temporal de la densidad de electrones máxima (curva roja) y sobre la sonda (curva azul) ($N_r = 281, N_v = 99, N_{Hres} = 96$).

4 CONCLUSIONES

La importancia de resolver el sistema de Vlasov-Poisson radica en sus aplicaciones a la caracterización de plasmas y al diseño de amarras espaciales electrodinámicas. Si bien los códigos tipo PIC son los usados más ampliamente por su robustez, flexibilidad y facilidad de paralelización, el desarrollo de un código de tipo Vlasov Euleriano es necesario en la búsqueda de una descripción precisa de las funciones de distribución. El trabajo aquí presentado es la primera etapa de un proceso de adaptación y extensión del programa diseñado originalmente en la Universidad Politécnica de Madrid (Sánchez-Arriaga, 2013) para estudiar la recolección inestacionaria de corriente en una sonda de Langmuir cilíndrica cuyo potencial es cambiado súbitamente desde cero hasta un valor finito.

Los resultados obtenidos hasta ahora se corresponden correctamente con los publicados en Sánchez-Arriaga, (2013) por lo que es posible de ahora en adelante continuar con el desarrollo del programa para que permita resolver el sistema de Vlasov-Maxwell en lugar del sistema Vlasov-Poisson. Esta extensión del código es importante para estudiar casos donde la sonda se mueve a gran velocidad respecto del plasma y casos donde el potencial de la sonda es variable en el tiempo.

En todos los casos simulados, se encuentra que la capa de plasma próxima a la sonda exhibe oscilaciones al cambiar el potencial de la sonda y luego converge hacia un estado estacionario.

La interacción entre el comportamiento del plasma y un potencial de la sonda variable en el tiempo es un problema no lineal, por lo que se cree que podría desembocar en una respuesta estacionaria, una oscilatoria o una caótica. De esto surge la necesidad de un estudio paramétrico mucho más amplio y detallado variando las temperaturas, el potencial y el radio de la sonda. Además, es interesante analizar el efecto que tendría tener en cuenta las colisiones.

Al comparar los resultados obtenidos con mallas de diferente resolución se encontró que las soluciones parecen no alcanzar una convergencia clara ni siquiera con la malla más densa presentada aquí. Sería pertinente un estudio más sofisticado de convergencia de la malla, donde si se logra una secuencia convergente, podría aplicarse el método de extrapolación de Richardson.

El nivel de ruido observado en los resultados conseguidos es muy bajo si se lo compara con resultados previos obtenidos con códigos tipo PIC. Sin embargo, el costo de recursos computacionales del código de Vlasov Euleriano es muy alto en términos de memoria y potencia de cálculo, razón por la cual no permite estudiar casos con potenciales de la sonda muy por encima de $15 k_B T_e$. Esto remarca la necesidad de optimizar el programa presentado y de paralelizarlo eficientemente.

Otros inconvenientes encontrados son la generación de valores negativos de las funciones de distribución durante la simulación, y la aparición de fluctuaciones espurias en las funciones de distribución en las cercanías de $r = r_{max}$ debidas posiblemente al carácter discontinuo en $v_\theta = 0$ de la condición de contorno impuesta sobre el límite exterior del dominio. En el futuro se intentará reducir ambos efectos al mínimo posible.

AGRADECIMIENTOS

Este proyecto está financiado con la beca doctoral del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Por su parte, Gonzalo Sánchez-Arriaga cuenta con el apoyo del Ministerio de Economía y Competitividad de España por medio del subsidio No. RYC-2014-15357 y del proyecto ENE2014-54960R. Finalmente, se agradece al Departamento de Aeronáutica de la Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (UNC) por prestar incondicionalmente sus instalaciones y recursos.

REFERENCIAS

- Bernstein, I. B., and Rabinowitz, I. N., Theory of electrostatic probes in a low density plasma. *Physics of Fluids*, 2(2):112-121, 1959.
- Calder, A. C., and Laframboise, J. G., Time-dependent sheath response to abrupt electrode voltage changes. *Physics of Fluids B: Plasma Physics*, 2:655-666, 1990.
- Choiniere, E., *Theory and experimental evaluation of a consistent steady-state kinetic model for two-dimensional conductive structures in ionospheric plasmas with application to bare electrodynamic tethers in space*. Ph.D. dissertation, University of Michigan, 2004.
- Conrad, J. R., Sheath thickness and potential profiles of ion-matrix sheaths for cylindrical and spherical electrodes. *Journal of Applied Physics*, 62:777-779, 1987.
- García, L. G., and Goedert, J., Numerical investigation of the influence of vacuum space on plasma sheath dynamics. *Physics Letters A*, 255(4-6):311-317, 1999.
- Iza, F., and Lee, J. K., Particle-in-cell simulations of planar and cylindrical Langmuir probes: Floating potential and ion saturation current. *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 24:1366-1372, 2006.
- Laframboise, J. G., *Theory of spherical and cylindrical Langmuir probes in a collisionless, Maxwellian plasma at rest*. Ph.D. dissertation, University of Toronto, 1966.
- Mandell, M. J., Davis, V. A., Cooke, D. L., Wheelock, A. T., and Roth, C. J., Nascap-2k

- spacecraft charging code overview. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 34:2084-2093, 2006.
- Mott-Smith, H. M., and Langmuir, I., The theory of collectors in gaseous discharges. *Physical Review*, 28(4):727-763, 1926.
- Onishi, T., *Numerical study of current collection by an orbiting bare tether*, Ph.D. dissertation, MIT, Cambridge, 2002.
- Roussel, J. F., Rogier, F., Dufour, G., Mateo-Velez, J. C., Forest, J., Hilgers, A., Rodgers, D., Girard, L., and Payan, D., SPIS open-source code: Methods, capabilities, achievements and prospects. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 36:2360-2368, 2008.
- Sánchez-Arriaga, G., A direct Vlasov code to study the non-stationary current collection by a cylindrical Langmuir probe. *Physics of Plasmas*, 20(1):013504, 2013.
- Sánchez-Arriaga, G., and Pastor-Moreno D., *Direct Vlasov simulations of non-stationary cylindrical Langmuir probes in flowing plasmas*. Departamento de Física Aplicada, Escuela Superior de Ingenieros Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid, 2014.
- Sanmartín, J. R., Martínez-Sánchez, M., and Ahedo, E., Bare wire anodes for electrodynamic tethers. *Journal of Propulsion and Power*, 9(3):353-360, 1993.
- Sanmartín, J. R., and Estes, R. D., The orbital-motion-limited regime of cylindrical Langmuir probes. *Physics of Plasmas*, 6:395-405, 1999.
- Sanmartín, J. R., Ion-Temperature-Sensitive effect in transient Langmuir probe response. *Physics of Fluids*, 15:391-401, 1972.
- Shoucri, M., Gerhauser, H., and Finken, K. H., 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*, 164:138-149, 2004.