

Rapport projet M1 : Implémentation d'une résolution de l'équation de Vlasov

Carybe BÉGUÉ

11 mai 2021

1 Résumé

Lors de ce projet, j'ai implémenté une résolution de l'équation de Vlasov en Julia. J'ai été encadré par Nicolas Crouseilles et Erwan Faou de l'équipe Mingus de l'Inria de Rennes.

Mon code se base sur la notion de méta particules et l'hypothèse que la fonction de distribution de probabilité des particules est une somme de Dirac en espace et en vitesse. Les particules sont représentées en une dimension.

Les différents paramètres sur lesquels l'utilisateur peut jouer sont :

- `nstep` le nombre d'itérations;
- `dt` le pas de temps;
- `L` la taille du domaine en espace (le domaine est en réalité un cercle). De `L` est déduit `kx`;
- `k` le paramètre du troncature du noyau (voir section 5);
- `np` le nombre de particules;
- `nx` le nombre de mailles pour le calcul de l'énergie électrique selon la méthode PIC (voir section 7.2.3);
- `alpha` la perturbation initiale (voir section 4).

La fonction `run` renvoie :

- `energy_hamil_elec` l'intégrale de l'énergie électrique calculée selon la méthode Hamiltonienne (voir section 7.2.2);
- `energy_pic` l'intégrale de l'énergie électrique calculée selon la méthode PIC (voir section 7.2.3);
- `energy_elec_from_phi` l'intégrale de l'énergie électrique calculée à partir du potentiel électrique (voir section 7.2.1);
- `energy_tot` l'énergie totale du système;
- `anime` le gif représentant l'évolution des particules au cours du temps (généralisé par la suite par la commande `gif(anime)`).

L'ensemble du code est disponible sur le git <https://github.com/Carybou/Projet-M1-PIC>. La fonction `run` se trouve dans le fichier `simul/main.jl`. À la fin du fichier, je propose une exécution de `run` ainsi que l'affichage de l'énergie totale et du logarithme de l'énergie électrique calculée selon les 3 méthodes de la section 7.2.

2 Solution $\Delta u = f$

On cherche à résoudre l'équation $\Delta u = f$ d'inconnue u , avec Δu laplacien de u , dans \mathcal{R}^d .

$$\begin{aligned}
\Delta u &= f \\
\sum_{n=1}^d \partial_{x_n}^2 u(x) &= f(x) \\
\sum_{n=1}^d (ik_n)^2 \widehat{u}(k) &= \widehat{f}(k) \quad \text{par transformée de Fourier} \\
-|k|^2 \widehat{u}(k) &= \widehat{f}(k) \quad \text{si } \widehat{f}(0) = 0
\end{aligned}$$

Notons $\mathcal{N}(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^{d*}} \frac{1}{|k|^2} e^{ik \cdot x}$. En fourier $\widehat{\mathcal{N}}(k) = \frac{1}{|k|^2}$.

D'où :

$$\begin{aligned}
\widehat{u}(k) &= -\mathcal{N}(k) \times \widehat{f}(k) \\
u(x) &= -(\mathcal{N} * f)(x)
\end{aligned}$$

3 Application à Vlasov

L'équation de Vlasov d'inconnue f , fonction de $x \in [0, L]$, v et t est :

$$\partial_t f + v \partial_x f - \partial_x \Phi \partial_v f = 0$$

Avec : $\Delta \Phi[f](x, t) = -\int f(x, v, t) dv + \frac{1}{L} \int \int f(x, v, t) dx dv$, potentiel d'interaction.

D'après la partie 2, $\Phi[f](x, t) = (\mathcal{N} * \int f(x, v, t) dv)(t)$, en supposant $\Delta \Phi[f]$ de moyenne nulle.

Soit $(X, V, \beta) = (X_k(t), V_k(t), \beta_k)_{k \in [1, N]}$ une solution approché de la fonction de distribution représentant N méta particules de position à l'instant t $X_k(t)$, de vitesse $V_k(t)$ et de masse donnée $\beta_k \in \mathbb{R}^+$. On a pour toutes méta particules k :

$$\begin{cases} \frac{dX_k}{dt} = V_k \\ \frac{dV_k}{dt} = -\partial_x \Phi(X_k, t) \end{cases}$$

Faisons l'hypothèse que $f^n(X, V) = \sum_k \beta_k \delta_{X_k^n} \delta_{V_k^n}$, avec $f^n(X, V) = f(X, V, t^n)$.

Ainsi :

$$\begin{aligned}
\Phi[f](x, t^n) &= (\mathcal{N} * \int f(x, v, t^n) dv)(t^n) \\
&= (\mathcal{N} * \int \sum_k \beta_k \delta_{X_k^n} \delta_{V_k^n} dv)(t^n) \\
&= (\mathcal{N} * \sum_k \beta_k \delta_{X_k^n} \int \delta_{V_k^n} dv)(t^n) \\
&= (\mathcal{N} * \sum_k \beta_k \delta_{X_k^n})(t^n) \\
&= \int \mathcal{N}(x - y) \sum_k \beta_k \delta_{X_k^n}(y) dy \\
&= \sum_k \beta_k \int \mathcal{N}(x - y) \delta_{X_k^n}(y) dy \\
&= \sum_k \beta_k \mathcal{N}(x - X_k^n)
\end{aligned}$$

Et ainsi :

$$\boxed{\frac{dV_k}{dt} = -\sum_{l=1}^N \beta_l \mathcal{N}'(X_k^n - X_l^n)}$$

En discrétisant le temps, on considère à présent les instants (t^0, t^1, \dots) d'intervalle Δt . Chaque méta particule est donc représenté par deux suites $(X_k^n, V_k^n)_{n \in \mathbb{N}}$.

$$\begin{cases} \frac{X_k^{n+1} - X_k^n}{\Delta t} = V_k^{n+1} & (1) \\ \frac{V_k^{n+1} - V_k^n}{\Delta t} = -\sum_{l=1}^N \beta_l \mathcal{N}'(X_k^n - X_l^n) & (2) \end{cases}$$

L'équation (1) est implicite, pour résoudre ce système, il faut procéder en 2 deux temps :

$$\Phi_v^{\Delta t} \begin{cases} \frac{X_k^{n+1} - X_k^n}{\Delta t} = 0 \\ \frac{V_k^{n+1} - V_k^n}{\Delta t} = -\sum_{l=1}^N \beta_l \mathcal{N}'(X_k^n - X_l^n) \end{cases}$$

$$\Phi_T^{\Delta t} \begin{cases} \frac{X_k^{n+1} - X_k^n}{\Delta t} = V_k^{n+1} \\ \frac{V_k^{n+1} - V_k^n}{\Delta t} = 0 \end{cases}$$

On résout en premier le système Φ_v pour calculer V_k^{n+1} puis le système Φ_t pour calculer X_k^{n+1} .

$$(X_k^{n+1}, V_k^{n+1}) = (\Phi_T^{\Delta t} \circ \Phi_v^{\Delta t})(X_k^n, V_k^n)$$

On peut résumer ces équations à un système Hamiltonien non canonique :

$$H(X, V) = \frac{1}{2} \sum_k \beta_k v_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k,l} \beta_k \beta_l \mathcal{N}(x_k - x_l)$$

Avec :

$$\begin{cases} \dot{x}_k = \frac{1}{\beta_k} \partial_{v_k} H \\ \dot{v}_k = -\frac{1}{\beta_k} \partial_{x_k} H \end{cases}$$

4 Échantillonnage initial

Notre solution f_0 de l'équation de Vlasov au temps initial est :

$$f_0(x, v, t) = \frac{1}{2\pi} (1 + \alpha \cos(k_x x)) \exp\left(-\frac{v^2}{2}\right)$$

avec $k_x = \frac{L}{2\pi}$ avec L la taille du domaine et $\alpha \in [0, 1[$ une petite perturbation. Notons que si $\alpha = 0$ alors f_0 est une solution stationnaire de l'équation de Vlasov. k_x vaut environ 0.5 et $\alpha \ll 1$ en général.

Échantillonnage de v La vitesse est simplement échantillonnée selon une gaussienne centrée en 0 et d'écart-type 1.

Échantillonnage de x La position des particules doit être échantillonnée selon une densité $f_x(x) = (1 + \alpha \cos(k_x x))$. Pour ce faire, on résout l'équation :

$$\int_0^x (1 + \alpha \cos(k_x y)) dy = x + \frac{\alpha}{k_x} \sin(k_x x) = r$$

avec $r \in [0, 1]$ choisi aléatoirement. Cette équation est résolue grâce à la méthode de Newton.

L'échantillonnage est fait dans la fonction `samples`.

5 Calcul de la constante C

Le calcul du noyau \mathcal{N} dépend du domaine de définition D choisi. Dans le cas où $D = \mathbb{R}$, on a bien $\mathcal{N}(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^{d^*}} \frac{1}{|k|^2} e^{ik \cdot x}$.

Cependant, on travaille ici dans $D = [0, L]$, ce qui implique l'ajout d'une constante multiplicative C dans \mathcal{N} i.e. $\mathcal{N}(x) = C \times \sum_{k \in \mathbb{Z}^{d^*}} \frac{1}{|k|^2} e^{ik \cdot x}$.

Pour une fonction g périodique de période L et régulière, on a :

$$g(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{i \frac{2\pi}{L} kx} \widehat{g}_k$$

Avec :

$$\widehat{g}_k = \frac{1}{L} \int_0^L e^{-i \frac{2\pi}{L} kx} g(x) dx$$

Pour déterminer C on va chercher à définir Φ en fonction de ρ . On veut résoudre :

$$-\partial_x^2 \Phi(x) = \rho(x)$$

Avec : $\int_0^L \Phi(x) dx = 0$ et $\rho(x) = \sum_{l=0}^N \beta_l \delta(x - x_l)$

D'une part :

$$\begin{aligned} -\partial_x^2 \Phi(x) &= -\partial_x^2 \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{i \frac{2\pi}{L} kx} \widehat{\Phi}_k \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{4\pi^2}{L^2} k^2 e^{i \frac{2\pi}{L} kx} \widehat{\Phi}_k \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{i \frac{2\pi}{L} kx} \left(\frac{4\pi^2}{L^2} k^2 \widehat{\Phi}_k \right) \end{aligned}$$

D'autre part :

$$\rho(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} e^{i \frac{2\pi}{L} kx} \widehat{\rho}_k$$

avec :

$$\begin{aligned} \widehat{\rho}_k &= \frac{1}{L} \int_0^L e^{-i \frac{2\pi}{L} kx} \rho(x) dx \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L e^{-i \frac{2\pi}{L} kx} \sum_{l=0}^N \beta_l \delta(x - x_l) dx \\ &= \frac{1}{L} \sum_{l=0}^N \beta_l \int_0^L e^{-i \frac{2\pi}{L} kx} \delta(x - x_l) dx \\ &= \frac{1}{L} \sum_{l=0}^N \beta_l e^{-i \frac{2\pi}{L} kx_l} \end{aligned}$$

En identifiant $\widehat{\Phi}_k$ pour $k \in \mathbb{Z}^*$, on obtient :

$$\begin{aligned} \widehat{\Phi}_k &= \frac{L^2}{4\pi^2 k^2} \widehat{\rho}_k \\ &= \frac{L}{4\pi^2 k^2} \sum_{l=0}^N \beta_l e^{-i \frac{2\pi}{L} kx_l} \end{aligned}$$

D'où, en supposant $\widehat{\Phi}_0 = 0$:

$$\begin{aligned} \Phi(x) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}^*} e^{i \frac{2\pi}{L} kx} \frac{L}{4\pi^2 k^2} \sum_{l=0}^N \beta_l e^{-i \frac{2\pi}{L} kx_l} \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}^*} \sum_{l=0}^N \frac{L}{4\pi^2 k^2} \beta_l e^{i \frac{2\pi}{L} k(x - x_l)} \end{aligned}$$

On tronque la somme sur k entre $-K$ et K et on en déduit :

$$\begin{aligned}\Phi(x) &= \sum_{\substack{k=-K \\ k \neq 0}}^K e^{i\frac{2\pi}{L}kx} \frac{L}{4\pi^2 k^2} \sum_{l=0}^N \beta_l e^{-i\frac{2\pi}{L}kx_l} \\ &= \sum_{l=0}^N \beta_l \sum_{\substack{k=-K \\ k \neq 0}}^K \frac{L}{4\pi^2 k^2} e^{i\frac{2\pi}{L}k(x-x_l)}\end{aligned}$$

En identifiant \mathcal{N} , on obtient :

$$\mathcal{N}(x) = \sum_{\substack{k=-K \\ k \neq 0}}^K \frac{L}{4\pi^2 k^2} e^{i\frac{2\pi}{L}kx}$$

Notons que lorsque $k = 1$, l'équation à résoudre devient l'équation de Vlasov-HMF.

6 Réécriture $\frac{dV_k}{dt}$

Ainsi, en réinjectant la formule de \mathcal{N} dans $\frac{dV_m}{dt}$ on obtient :

$$\begin{aligned}\frac{dV_m}{dt} &= - \sum_{l=1}^N \beta_l \mathcal{N}'(X_m^n - X_l^n) \\ &= - \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{\substack{k=-K \\ k \neq 0}}^K i\frac{2\pi}{L}k \frac{L}{4\pi^2 k^2} e^{i\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n)} \\ &= - \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{\substack{k=-K \\ k \neq 0}}^K i\frac{1}{2\pi k} e^{i\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n)} \\ &= - \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{k=1}^K i\frac{1}{2\pi k} e^{i\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n)} - i\frac{1}{2\pi k} e^{-i\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n)} \\ &= - \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{k=0}^K i\frac{1}{2\pi k} (e^{i\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n)} - e^{-i\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n)}) \\ &= - \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{k=1}^K i\frac{1}{2\pi k} (2i \sin(\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n))) \\ &= \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{k=1}^K \frac{1}{\pi k} \sin(\frac{2\pi}{L}k(X_m^n - X_l^n)) \\ &= \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{k=1}^K \frac{1}{\pi k} (\sin(\frac{2\pi}{L}kX_m^n) \cos(\frac{2\pi}{L}kX_l^n) - \sin(\frac{2\pi}{L}kX_l^n) \cos(\frac{2\pi}{L}kX_m^n)) \\ &= \sum_{k=1}^K \frac{1}{\pi k} [\sin(\frac{2\pi}{L}kX_m^n) \sum_{l=1}^N \beta_l \cos(\frac{2\pi}{L}kX_l^n) - \cos(\frac{2\pi}{L}kX_m^n) \sum_{l=1}^N \beta_l \sin(\frac{2\pi}{L}kX_l^n)]\end{aligned}$$

En notant $S_k = \sum_{l=1}^N \beta_l \sin(\frac{2\pi}{L}kX_l^n)$ et $C_k = \sum_{l=1}^N \beta_l \cos(\frac{2\pi}{L}kX_l^n)$, on obtient :

$$\frac{dV_m}{dt} = \sum_{k=1}^K \frac{1}{\pi k} [\sin(\frac{2\pi}{L}kX_m^n) C_k - \cos(\frac{2\pi}{L}kX_m^n) S_k]$$

Les S_k et C_k sont ainsi précalculés ce qui fait baisser la complexité de l'algorithme. En effet, le précalcul a une complexité en $\mathcal{O}(KN)$ et la mise à jour des V_k est ainsi en $\mathcal{O}(KN)$. L'algorithme est donc linéaire en N au lieu de quadratique sans le précalcul des S_k et C_k .

7 Calcul de l'intégrale de l'énergie électrique

7.1 Calcul du potentiel électrique en X_k^n

On sait que $\Phi(X_m^n) = \sum_{l=1}^N \beta_l \mathcal{N}(X_m^n - X_l^n)$. En remplaçant \mathcal{N} par son expression, on obtient de manière similaire que pour le calcul de $\frac{dV_m}{dt}$:

$$\begin{aligned}\Phi(X_m^n) &= \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{\substack{k=-K \\ k \neq 0}}^K \frac{L}{4\pi^2 k^2} e^{i \frac{2\pi}{L} k (X_m^n - X_l^n)} \\ &= \sum_{l=1}^N \beta_l \sum_{k=1}^K \frac{L}{2\pi^2 k^2} \cos\left(\frac{2\pi}{L} k (X_m^n - X_l^n)\right) \\ &= \sum_{k=1}^K \frac{L}{2\pi^2 k^2} [\cos\left(\frac{2\pi}{L} k X_m^n\right) C_k + \sin\left(\frac{2\pi}{L} k X_m^n\right) S_k]\end{aligned}$$

7.2 Cacul de l'Énergie électrique $\int_0^L E^2(x, t) dx$

7.2.1 Cas 1 : calcul de $E(x, t)$ via le potentiel

On a $E(x, t) = -\frac{\partial \Phi}{\partial t}(x)$.

D'où pour $t = t^n$:

$$\begin{aligned}\int_0^L E^2(x, t^n) dx &= \int_0^L \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}(x)\right)^2 dx \\ &= \sum_{l=1}^N \left(\frac{\partial \Phi}{\partial x}(X_l^n)\right)^2 \times \frac{L}{N}\end{aligned}$$

avec $\frac{\partial \Phi}{\partial t}(X_l^n)$ calculé dans `update_velocities`

7.2.2 Cas 2 : méthode "hamiltonienne"

$$\begin{aligned}\int_0^L E^2(x, t^n) dx &= \int_0^L \Phi(x, t) \left(\int_{\mathbb{R}} f(x, v, t^n) dv\right) dx \\ &= \int_0^L \Phi(x, t^n) \left(\int_{\mathbb{R}} \sum_{l=1}^N \beta_l \delta(x - X_l^n) \delta(v - V_l^n) dv\right) dx \\ &= \int_0^L \Phi(x, t^n) \left(\sum_{l=1}^N \beta_l \delta(x - X_l^n)\right) dx \\ &= \sum_{l=1}^N \int_0^L \beta_l \Phi(x, t^n) \delta(x - X_l^n) dx \\ &= \sum_{l=1}^N \beta_l \Phi(X_l^n, t^n)\end{aligned}$$

avec $\Phi(X_l^n)$ calculé dans `update_velocities`

Lors des tests, il est apparu que $\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \beta_l \Phi(X_l^n, t^n)$ pouvait avoir des valeurs légèrement négatives du fait des calculs de sinus et cosinus. Il est donc nécessaire de prendre le maximum entre cette valeur et un seuil (proche de 0) afin de pouvoir tracer le logarithme de l'énergie électrique.

7.2.3 Cas 3 : méthode PIC

En troisième méthode, on calcule l'énergie électrique directement à partir des positions $(X_l^n)_{l \in \llbracket 1, N \rrbracket}$ afin d'obtenir un calcul fiable.

Calcul de ρ densité de charge On calcule la densité de charge sur les point d'un maillage régulier de pas $dx = \frac{L}{n_p}$ avec L taille du domaine et n_p nombre de mailles.

Pour ce faire, le poids chaque particule va être réparti entre les deux points du maillage l'encadrant selon une fonction triangle. Si la particule l de position X_l^n et de point β_l se trouve dans la i eme maille alors :

$$\rho_{i-1} += (X_l^n - (i-1) \times dx) \times \frac{\beta_l}{dx}$$

$$\rho_i += (i \times dx - X_l^n) \times \frac{\beta_l}{dx}$$

La densité de charge est calculée dans `compute_rho`.

Calcul de Φ le potentiel électrique On a $\partial_x^2 \Phi = -\rho$. Φ est calculé aux points du maillage à partir de ρ , en inversant la matrice du Laplacien :

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & & & \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & & \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & & \end{pmatrix}$$

Le potentiel électrique est calculé dans `compute_phi`.

Calcul de E le champ électrique On a $E = -\frac{\partial \Phi}{\partial x}$. Ainsi, on déduit E aux points du maillage en calculant le taux d'accroissement de Φ , calculé précédemment.

Le champ électrique est calculé dans `compute_E`.

8 Résultats

La figure 1 représente la répartition des particules en position et vitesse pour $kx = 0.5$ et une perturbation initiale de $\alpha = 0.1$. L'ammortissement de Landau associé est en figure 3. Sont représentées les trois méthodes de calcul de l'énergie vues précédemment en traçant le logarithme népérien de la norme L_2 du champ électrique soit $\log(\sqrt{\int_0^L E^2(x,t)dx})$. On observe que la méthode PIC n'est plus efficace au delà de 15s alors que les deux autres méthodes donnent toujours des résultats cohérents. Cet effet est d'autant plus visible pour des petites perturbations comme sur les figures 2 et 4, pour des valeurs de α de 0.05 et 0.01.

FIGURE 1 – $kx = 0.5$, $\alpha = 0.1$

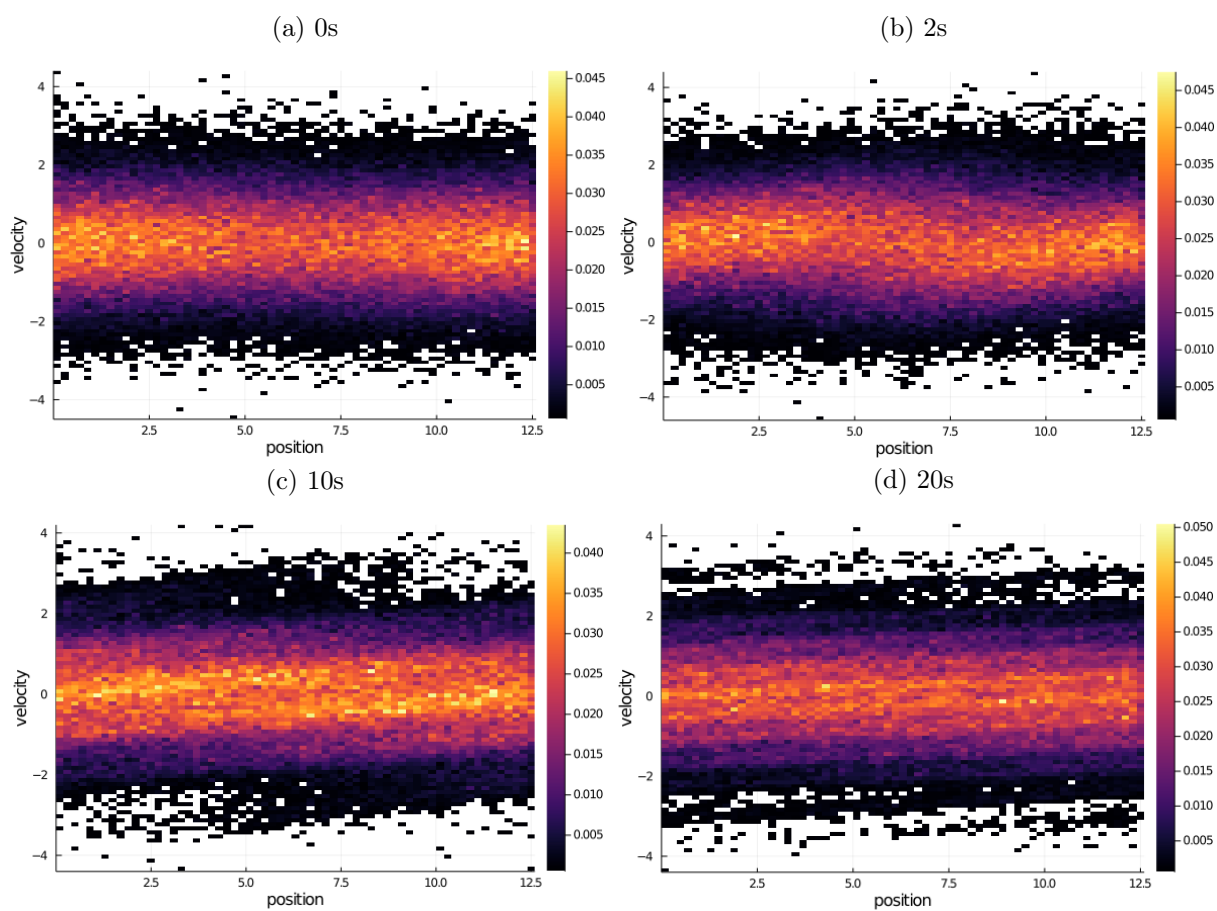


FIGURE 2 – Amortissement de Landau pour $kx = 0.5$, $\alpha = 0.1$

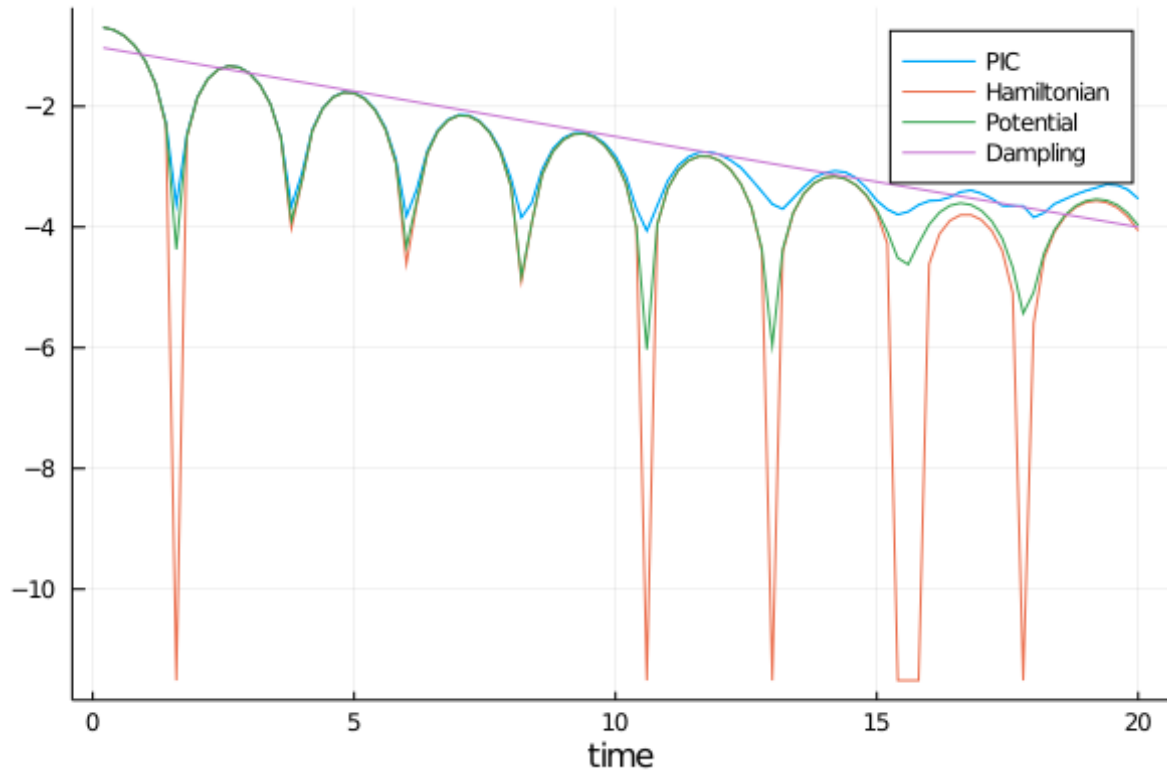


FIGURE 3 – Amortissement de Landau pour $kx = 0.5$, $\alpha = 0.05$

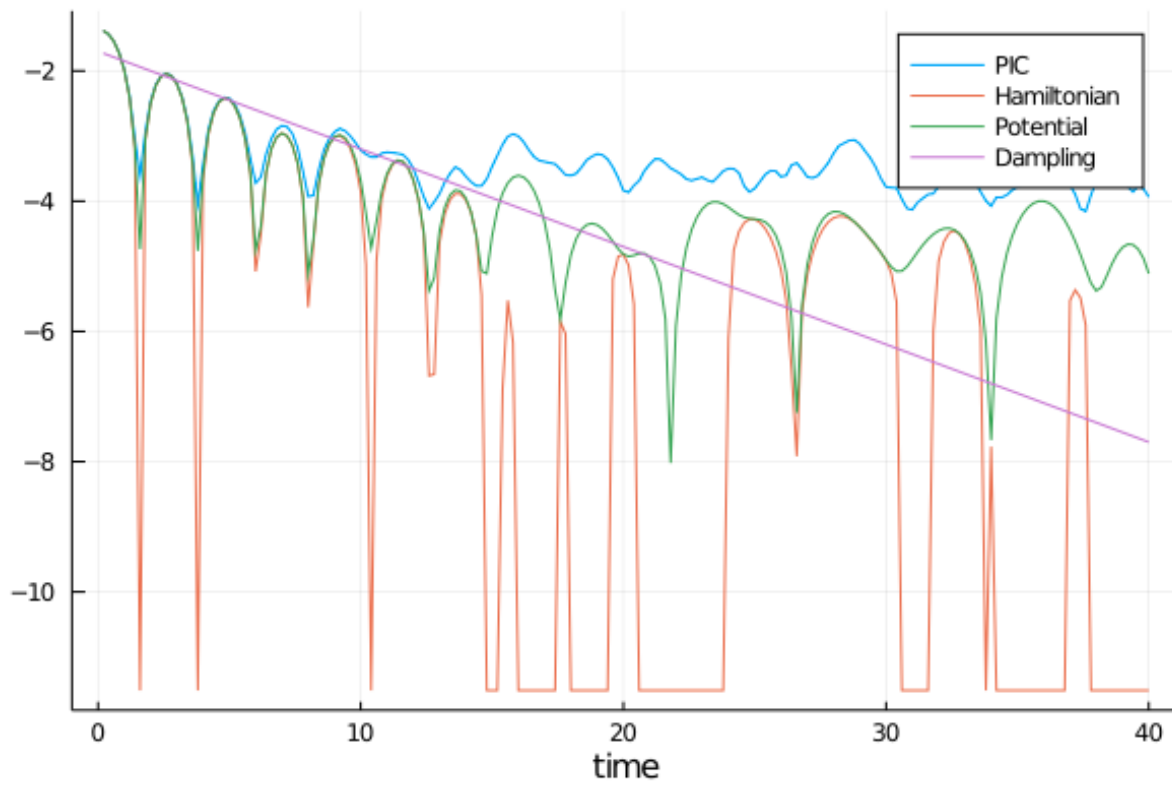


FIGURE 4 – Amortissement de Landau pour $kx = 0.4$, $\alpha = 0.01$

