

Simulación de plasmas mediante las ecuaciones cinéticas de deriva en geometrías complejas



José Miguel Reynolds Barredo

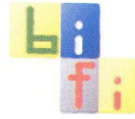
Departamento de Física Teórica

Facultad de Ciencias

Universidad de Zaragoza

Instituto de Biocomputación y

Física de Sistemas Complejos



D. Alfonso Tarancón Lafita, Profesor titular del Departamento de Física Teórica de la Universidad de Zaragoza

y

D. Daniel López Bruna, Investigador Titular del Laboratorio Nacional de fusión del CIEMAT

HACEN CONSTAR:

que la presente memoria de Tesis Doctoral presentada por D. José Miguel Reynolds Barredo y titulada "*Simulación de plasmas mediante las ecuaciones cinéticas de deriva en geometrías complejas*" ha sido realizada bajo su dirección en el Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos. El trabajo recogido en dicha memoria se corresponde con el planteado en el proyecto de tesis doctoral aprobado en su día por el órgano responsable del programa de doctorado.

Y para que conste, en cumplimiento de la legislación vigente, informan favorablemente sobre la referida Tesis Doctoral y autorizan su presentación para su admisión a trámite.

Zaragoza, 5 de Septiembre de 2009

Los directores de la Tesis

Fdo: Alfonso Tarancón Lafita

Fdo: Daniel López Bruna

A MIS PADRES,
MIGUEL Y MARÍA LUISA.

Y A MIS HERMANOS,
ABRAHAM, SAMANTHA Y EVA.

*La madurez del hombre es haber vuelto a encontrar
la seriedad con la que jugaba cuando era niño.*

Friedrich Wilhelm Nietzsche

Índice

Agradecimientos	XIII
RESUMEN	XV
Lista de símbolos	XXIII
Lista de acrónimos	XXV
1. Introducción	1
1.1. Introducción a la física básica de plasmas de fusión	1
1.2. Ecuaciones esenciales de transporte en plasmas confinados	5
1.3. Métodos de simulación y otras cuestiones numéricas	9
1.3.1. Métodos de computación	9
1.3.2. Métodos utilizados en el área de fusión	16
1.4. Objetivos y planificación	20
Referencias	21
2. Fundamentos teóricos	29
2.1. Introducción al modelo teórico	29
2.2. Ecuación de evolución	36
2.2.1. Coordenadas	36
2.2.2. Derivas del centro guía	40
2.2.3. Aceleraciones	41
2.2.4. Término colisional	42
2.3. Función de distribución	44
2.3.1. Criterios generales de elección	44

2.3.2.	Funciones base mediante polinomios ortogonales clásicos	46
2.3.3.	Momentos de la función de distribución	48
2.3.4.	Restricción del problema a un subespacio	51
2.3.5.	Bases mal adaptadas al problema	53
2.3.6.	Expansión del término colisional	55
2.4.	Adaptación al esquema numérico	58
2.4.1.	Discretización espacial y distribución de magnitudes . .	59
2.4.2.	Separación de los términos de flujo	61
2.4.3.	Evolución del desarrollo espectral	63
2.4.4.	Proyección del término colisional	65
2.4.5.	Evaluación de integrales por cuadraturas	66
	Referencias	67
3.	Métodos numéricos	73
3.1.	Introducción a las técnicas numéricas	73
3.2.	Método SDM	77
3.3.	Condiciones de contorno	85
3.4.	Obtención de soluciones	88
3.4.1.	Avance temporal	89
3.4.2.	Estados estacionarios	90
3.5.	Mallado	92
3.6.	Paralelización	100
	Referencias	102
4.	Convergencia y comprobaciones: tokamak axisimétrico	105
4.1.	Condiciones de trabajo	106
4.1.1.	Geometrías magnéticas	106
4.1.2.	Parámetros de las simulaciones	113
4.1.3.	Mallas	114
4.2.	Reducción de las ecuaciones a los supuestos de la teoría	117
4.2.1.	Ordenamiento de escalas	117
4.2.2.	Ecuación de centro guía	121
4.2.3.	Campo eléctrico	124
4.2.4.	Estimación del orden de los términos	124
4.2.5.	Ecuación de evolución en orden cero	125
4.2.6.	Ecuación de evolución en primer orden	127
4.2.7.	Órdenes superiores	129
4.2.8.	Flujos de partículas y calor	129

4.3.	Estudios de convergencia	132
4.3.1.	Convergencia espacial	132
4.3.2.	Convergencia en el espacio de velocidades	134
4.4.	Comparación con la teoría neoclásica	136
4.4.1.	Fórmulas	136
4.4.2.	Ambipolaridad	141
4.4.3.	Comparaciones	142
4.4.4.	Excursiones radiales de los centros guía	147
	Referencias	147
5.	Cálculos en una geometría compleja: TJ-II	151
5.1.	Geometría magnética	151
5.2.	Condiciones de trabajo	153
5.3.	Estudio de convergencia	155
5.4.	Influencia del campo eléctrico radial	156
5.5.	Resultados 3D	163
5.6.	Trabajo futuro	167
	Referencias	168
6.	Conclusiones	171
A.	Tratamiento de la ecuación de deriva	175
A.1.	Ecuación de evolución desarrollada	175
A.2.	Ejemplo: Reducción a la ecuación de evolución para teoría Neoclásica	181
A.3.	Anexo: Términos conservativos en forma equivalente	182
	Referencias	184
B.	Método matricial para el desacoplo de modos	187
B.1.	Introducción	188
B.2.	Matrices en bloque	189
B.2.1.	Notación y propiedades	189
B.2.2.	Resolución de suma de matrices en bloque	191
B.3.	Encontrando estacionarios en el sistema real	193
B.3.1.	Adaptación del problema	194
B.3.2.	Resolución	196
	Referencias	198

C. Detalles de implementación	201
C.1. Paralelización	201
C.1.1. Eficiencia	202
C.2. Codificación	202
C.2.1. Código de simulación	204
C.2.2. Software de visualización	204
C.2.3. Otros detalles	204
Referencias	205
D. Sistema de visualización en estéreo	209
D.1. Plataforma Hardware	210
D.2. Software	216
D.3. Resultado	217
Referencias	218

Agradecimientos

Cito a continuación la larga lista de personas que han contribuido, de una forma u otra, a la elaboración de esta tesis:

En primer lugar agradezco a mis directores, Alfonso y Daniel, el tiempo dedicado a mi formación y la ayuda prestada en la elaboración del trabajo presentado en esta tesis, y por su paciencia conmigo.

Agradezco a Francisco Castejón sus comentarios, consejos, y nuestras animadas conversaciones sobre física de plasmas y otros temas.

A José Guasp, por su maravillosa librería. Gracias a ella la geometría del TJ-II es un poquito más sencilla.

A Jesús Romero, por *prestar*me su librería para cálculo de campos magnéticos, y a Antonio López Fraguas por las explicaciones en numerosas cuestiones relativas al campo magnético del TJ-II.

Agradezco los comentarios de Víctor Tribaldos y Edilberto Sánchez durante la elaboración y el proceso de revisión interna de los informes técnicos Ciemat.

Igualmente agradezco a Luís García haberme dirigido el trabajo para obtener el DEA pues fue, en cierto modo, introductorio a la elaboración de esta tesis.

A Raúl Sánchez, por sus comentarios. También a Emily Belli por sus aclaraciones por correo electrónico.

A José Luis Velasco, por sus agudos comentarios, y por haber compartido tan buenos momentos durante la tesis.

A Jesús Clemente por nuestras interminables conversaciones sobre física y matemáticas, y sobre todo, por no haber huido de ellas. También a Pierpaolo Bruscolini, por motivos muy parecidos.

A mis compañeros de despacho, por todos estos años compartidos y especialmente a Rubén Vallés, Fermín Serrano, Guillermo Losilla, Arturo Giner y por su ayuda en todas las cuestiones informáticas.

A Isabel Vidal y Beatriz Antolí, porque sin su inestimable ayuda en las

cuestiones administrativas tampoco podría haber llevado a cabo esta tesis.

Especialmente quiero agradecer al BIFI y a las personas que así lo decidieron, la oportunidad que me han brindado al realizar mi tesis doctoral, pues sin el apoyo económico del centro, a través de las Becas de Personal investigador en formación (PIF), no hubiese podido llevar a cabo nada de lo aquí presentado.

También agradecer al CIEMAT las ayudas para “Acceso de Investigadores Externos a la gran Instalación científica Stellarator TJ-II” durante las numerosas estancias en ese centro. Gran parte de la computación necesaria durante la tesis se llevó a cabo en la máquina de memoria compartida SGI Altix 3700 del CIEMAT, por ello agradezco a sus administradores y al CIEMAT haberme permitido su uso. La capacidad de computación del BIFI se ha utilizado en menor medida, pero no por ello dejo de agradecer el haberme sido permitido su uso y, a sus administradores (mis compañeros de despacho), el tiempo dedicado.

Por supuesto lo que soy se lo debo a mis padres, Maria Luisa y Miguel, así que el mayor agradecimiento para ellos, y a mis hermanos, Abraham, Samantha y Eva.

Y por supuesto a ti, aguerrido lector.

Zaragoza, 1 de septiembre de 2009.

Fdo: José Miguel Reynolds Barredo

RESUMEN

En esta tesis se presenta un nuevo código de cálculo numérico diseñado para obtener la evolución de la función de distribución de iones y electrones en dispositivos toroidales de fusión por confinamiento magnético. El trabajo viene motivado por la necesidad de estudiar aspectos inabordables para los códigos tradicionales de transporte. Éstos se basan en que las distintas magnitudes del plasma pueden describirse como promedios a las superficies de flujo magnético cuya existencia, pues, se da por hecha en todo el plasma. Puesto que también los elementos métricos se promedian para obtener, a su vez, descripciones razonables de los gradientes promedio y diversas magnitudes integrales, se habla a menudo de códigos de “dimensión 1,5”, o 1,5-D. Ejemplos de tales aspectos prohibidos son (i) cualquier estudio relacionado con la presencia de islas magnéticas o, en general, con la ruptura del anidamiento perfecto de las superficies magnéticas, (ii) la presencia de fuentes que alteran directamente la función de distribución, como los efectos cinéticos a menudo asociados a las fuentes de calentamiento, (ii) o simplemente la consideración de las variaciones de las magnitudes del plasma (densidad, temperatura, ...) sobre las superficies magnéticas bien formadas, cuyo efecto en los flujos no tiene por qué ser despreciable.

El programa concebido es muy amplio, pero no por ello se ha desconsiderado tomarlo como marco para un trabajo de tesis. En la presente memoria se ha pretendido establecer una base sólida desde la cual se pueda acceder a los estudios que la han motivado: la difícil física de los plasmas del *stellarator* TJ-II. Como es lógico, la puerta quedará igualmente abierta para estudiar cualquier otra máquina de geometría toroidal. Así pues, como mínimo se ha pretendido (i) mostrar claramente el fundamento teórico del código de cálculo; (ii) escoger y probar las herramientas numéricas necesarias; (iii) codificar consecuentemente las ecuaciones y el software de apoyo para el análisis de sus resultados (p. ej. la interfaz con el usuario a través de herramientas avanzadas de visualización tridimensional); y (iv) contrastar los resultados de todo el ensamblaje con la teoría básica. En el resto de la memoria presentaremos todos estos aspectos siguiendo el orden siguiente:

En primer lugar, en el capítulo introductorio, se dará una breve pero general visión de la fusión por confinamiento magnético. En ella se introducirán conceptos tan importantes como el transporte radial, los flujos de calor y partículas y, por supuesto, el confinamiento magnético como mecanismo para conseguir fusión. Además se introducirán los diferentes modelos y métodos de computación utilizados en el área de plasmas de alta temperatura para así encuadrar el código presentado.

En el capítulo 2 se estudian los fundamentos físicos del modelo y se prepara para ser resuelto mediante técnicas de computación. Entonces se hace posible, bajo las condiciones de trabajo, hallar la evolución de la ecuación cinética de deriva en máquinas complejas teniendo en cuenta todas las características cinéticas.

En el capítulo 3 se presenta el método computacional para resolver las ecuaciones establecidas. En él se detalla la forma de construir las mallas sobre las que se resolverá el problema, cómo se hace la convección de la función de distribución, qué condiciones de contorno se adoptan, cómo se hace la evolución temporal y se alcanzan los estados estacionarios, etcétera.

En el capítulo 4 se llevan a cabo las comprobaciones, esenciales para entender si el código está funcionando como debe. Para ello se realizan pruebas de convergencia, ambipolaridad y comparación con la teoría Neoclásica en el caso de un *tokamak* axisimétrico.

En el capítulo 5 se muestra la capacidad del código a la hora de simular aquello para lo que está diseñado: geometrías complejas tales como la del TJ-II. Se presentan algunos resultados preliminares para dicha geometría, así como el futuro en esta línea.

Por último en el capítulo 6 se establecen las conclusiones finales.

Varios aspectos colaterales pero que deben ser documentados por su importancia se han incluido a modo de apéndices:

- En el apéndice A se establece un puente entre las ecuaciones desarrolladas a lo largo de la tesis, y la forma final en la que han sido codificadas. A lo largo de este proceso se pueden reconocer qué términos son los

responsables de las excursiones radiales grandes de los centros guía, qué términos son lineales y cuales no.

- Un problema muy importante a la hora de obtener resultados relevantes es encontrar un modo eficiente de invertir las matrices del modelo para alcanzar estados estacionarios. En el apéndice B se mostrarán unas nociones de cómo conseguirlo.
- Aunque los detalles de la implementación del código fuente no son relevantes desde un punto de vista físico, sí es interesante dar algunos datos y estadísticas al respecto. El apéndice C se encarga de ello.
- Existe otro trabajo desarrollado paralelamente a la construcción del código (apéndice D): una plataforma hardware de realidad expandida y el software ad hoc. El dispositivo permite representar datos en tres dimensiones y lanzar simulaciones de diferentes tipos relacionados o no con la fusión. El usuario tiene capacidad de interacción mediante varios sensores de posición.

A continuación se resumen las contribuciones científicas realizadas durante la elaboración de esta tesis.

Artículos en revistas:

J. M. Reynolds, D. López-Bruna, "Evolution of the drift kinetic equation in guiding center approximation: numerical aspects of a new 3-D code", Special Issue of the IEEE Trans. on Plasma Sci. on Numerical Simulation of Plasma. En preparación

J. Sánchez et al., "Confinement transitions in TJ-II under Li-coated wall conditions", Nucl. Fusion, Vol 49, pp 104018, 2009.

F. Castejon, J.M. Reynolds, F. Serrano, A. Tarancon, R. Valles, J.L. Velasco, "Fusion Plasma simulation in the interactive grid", Computing and Informatics, Vol 27, pp 261-270, 2008.

Integrid Consortium, "The interactive European grid: project objectives and achievements", Computing and Informatics, Vol 27, pp 161-171, 2008.

F. Castejón, J. M. Reynolds, J. M. Fontdecaba, D. López-Bruna, R. Balbín, J. Guasp, D. Fernández-Fraile, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, and A. Tarancón, “Ion orbits and ion confinement studies on ECRH plasmas in TJ-II stellarator”, Fusion Science and Technology, Vol 50, pp 412-418, 2006.

Proceedings:

J. M. Reynolds, D. López-Bruna, “Numerical aspects of a code to solve the drift kinetic equations for electrons and ions in general toroidal geometries”, 21th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, Lisboa (Portugal), 6–9 oct. 2009. En preparación

D. López-Bruna, Á. Cappa, F. Castejón, M.A. Ochando, J. L. Vázquez-Poletti, J. M. Reynolds, J. Guasp, Cálculo numérico integrado para el estudio de la física de plasmas en dispositivos de fusión por confinamiento magnético, Comunicaciones Científicas de la Real Sociedad Española de Física ISBN 978-84-692-4956-7, p. 503, XXIII Bienal de la de la RSEF, Ciudad Real 7–11 sept. 2009.

J. M. Reynolds, D. Lopez-Bruna, J. Guasp, J.L. Velasco, A. Tarancon, “Simulating drift kinetic electron-ion equation with collisions in complex geometry”, 35th EPS Plasma Physcs Conference. Hersonissos (Crete island, Greece), June 9-13 2008.

F. Castejon, D. Lopez Bruna, J. M. Reynolds, A. Tarancon, R. Valles, J.L. Velasco, “Fusion Simulations, data visualization results and future requirements for the interactive grid infrastructure”, Ingrid 2008: Instrumenting the grid. Lacco ameno (Ischia island, Italy), April 9-11, 2008.

J. M. Reynolds, D. Lopez-Bruna, J. Guasp, J.L. Velasco, A. Tarancon, “A new code for collisional drift kinetic equation solving”, Large scale simulations of complex systems, condensed and fusion plasma: Proceedings of the BIFI2008 International Conference: Large Scale Simulations of Complex Systems, Condensed Matter and Fusion Plasma, ISBN: 978-0-7354-0602-5. Zaragoza (Spain), 6–8 February, 2008.

F. Castejón, A. Gómez-Iglesias, A. Bustos, I. Campos, Á. Cappa, M. Cárdenas, L. A. Fernández, L. A. Flores, J. Guasp, E. Huedo, D. López-Bruna, I. M. Llorente, V. Martín-Mayor, R. Mayo, R. S. Montero, E. Montes, J. M. Reynolds, M. Rodríguez, A.

J. Rubio-Montero, A. Tarancón, M. Tereshchenko, J. L. Vázquez-Poletti, J. L. Velasco, Grid Computing for Fusion Research, IBERGRID 2009: 3rd Iberian Grid Infrastructure Conference IBERGRID Proceedings. Santa Cristina: NETBIBLO S.L., 2009. Vol. 3, pp. 291–302. ISBN: 9788497454063. Valencia (España), 20-22 mayo, 2009.

I. Campos, F. Castejón, G. Losilla, J.M. Reynolds, F. Serrano, A. Tarancón, R. Vallés, J.L. Velasco, IVISDEP: A Fusion Plasma Application ported to the Interactive European Grid e-Infrastructure, CEDI 2007, II Congreso español de informática, pp 501. Zaragoza (Spain), September 11-14, 2007.

B. Antolí, F. Castejón, A. Giner, G. Losilla, J.M. Reynolds, A. Rivero, S. Sangiao, F. Serrano, A. Tarancón, R. Vallés, J.L. Velasco, “ZIVIS: A City Computing Platform Based on Volunteer Computing”, CEDI 2007, II Congreso español de informática, pp 523. Zaragoza (Spain) , September 11-14, 2007.

V. I. Vargas, D. López-Bruna, J. M. Reynolds, T. Estrada, J. L. Velasco, J. Guasp, “Electron diffusivity profiles in ECH plasmas of the TJ-II Helic”, 34th EPS Plasma Physics Conference. Hersonissos (Varsovia, Polonia), July 2-6 2007.

B. Antolí, F. Castejón, A. Giner, G. Losilla, J.M. Reynolds, A. Rivero, S. Sangiao, F. Serrano, A. Tarancón, R. Vallés, J.L. Velasco, “ZIVIS: a City Computing Platform Based on Volunteer Computing”, IBERGRID: 1st Iberian Grid Infrastructure Conference Proceedings ISBN 978-84-611-6634-3. Santiago de Compostela, May 14-16, 2007.

I. Campos, F. Castejón , G. Losilla, J.M. Reynolds , F. Serrano , A. Tarancón, R. Vallés ,J.L. Velasco, “IVISDEP: A Fusion Plasma Application ported to the Interactive European Grid e-Infrastructure”, Spanish Conference on E-Science Grid Computing, Conference Proceedings. Madrid (Spain), March 1-2, 2007.

B. Antolí, F. Castejón, A. Giner, G. Losilla, J.M. Reynolds, A. Rivero, S. Sangiao, F. Serrano, A. Tarancón, R. Vallés, J.L. Velasco. “ZIVIS: a City Computing Platform Based on Volunteer Computing”. Spanish conference on E-Science Grid Computing, Conference Proceedings. Madrid (Spain), March 1-2, 2007.

I. Campos, F. Castejón, G. Losilla, J.M. Reynolds, F. Serrano, A. Tarancón, R. Vallés, J.L. Velasco, “Fusion Plasma Application in the Interactive European Grid e-Infrastructure”, Book of Abstracts, IBERGRID Proc. Of ‘IBERGRID; 1st. Iberian Grid Infrastructure Conference. Marzo de 2007.

J. M. Reynolds, F. Serrano, R. Vallés. "Fusion Application MPI Approach", int.eu.grid Cracow Meeting. Cracow (Poland), 2007

F. Castejón, J. M. Reynolds, J. M. Fontdecaba, D. López-Bruna, R. Balbín, J. Guasp, D. Fernández-Fraile, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, and A. Tarancón, "Ion orbits and ion confinement studies on ECRH plasmas in TJ-II stellarator", Proceedings of 15th Stellarator Workshop. Madrid, (Spain), October 3-7, 2005.

F. Castejón, J. M. Fontdecaba, D. López-Bruna, R. Balbín, J. Guasp, D. Fernández-Fraile, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, J. M. Reynolds, A. Tarancón, "Ion orbits and ion confinement studies on ECRH plasmas in TJ-II stellarator", Proc. of 11th European Fusion Theory Conference. Aix-en-Provence (France), September 26-28, 2005.

Informes científico-técnicos:

J. M. Reynolds, D. López-Bruna, "Cálculo numérico del transporte mediante la ecuación cinética de deriva para plasma en geometría magnética toroidal: convergencia y comparaciones", Informes Técnicos Ciemat. ISSN 1135-9420. 2009. En prensa

J. M. Reynolds, D. López-Bruna, "Cálculo numérico del transporte mediante la ecuación cinética de deriva para plasma en geometría magnética toroidal: métodos numéricos", Informes Técnicos Ciemat nº 1172, ISSN 1135-9420. julio, 2009.

J. M. Reynolds, D. López-Bruna, "Cálculo numérico del transporte mediante la ecuación cinética de deriva para plasma en geometría magnética toroidal: Preliminares", Informes Técnicos Ciemat nº 1165, ISSN 1135-9420. mayo, 2009.

V. I. Vargas, D. López-Bruna, J. Guasp, J. Herranz, T. Estrada, F. Medina, M. A. Ochando, J. L. Velasco, J. M. Reynolds, J. A. Ferreira, D. Tafalla, F. Castejón, A. Salas and the TJ-II Team, "Density dependence of particle transport in ECH plasmas of the TJ-II stellarator", Informes Técnicos Ciemat nº 1162, ISSN 1135-9420. febrero, 2009.

V.I. Vargas, D. Lopez-Bruna, T. Estrada, J. Guasp, J.M. Reynolds, J.L. Velasco, J. Herranz, "Transporte de particulas en plasmas ECRH del TJ-II", Informes Tecnicos Ciemat nº 1129, ISSN 1135-9420. Diciembre, 2007.

Lista de símbolos

\mathbf{r}	Coordenadas espaciales
\mathbf{v}	Coordenadas velocidad
ψ	Flujo poloidal dividido por 2π
ϕ	Ángulo toroidal
θ	Ángulo poloidal
\mathbf{B}	Vector campo magnético
\mathbf{E}	Vector campo Eléctrico
ϕ	Ángulo toroidal
Γ	Flujo de partículas
\mathbf{Q}	Flujo de calor
t	Transformada rotacional
λ_D	Longitud de Debye
L_H	Longitud hidrodinámica
λ_{mfp}	Recorrido libre medio
ϵ	Parámetro de expansión en radio de larmor
ρ_L	Radio de larmor
Ω_L	Frecuencia de giro de Larmor
λ	Pitch
β	Coordenada de velocidad cuadrática normalizada
v_{cg}	Velocidad de centro guía
v_t	Velocidad de normalización
m_α	Masa de una especie
q_α	Carga eléctrica de una especie
ρ_p	Radio de Larmor poloidal
$\Delta\rho$	Excursión radial de orbitas del tipo <i>banana</i>
N_ν	Número de elementos en la expansión en β
N_λ	Número de elementos en la expansión en λ
τ_α	Tiempo de colisión de una especie
$\nu_{*\alpha}$	Colisionalidad normalizada de una especie
$\ln \Lambda$	Logaritmo de Coulomb

Lista de acrónimos

FdD	Función de distribución
MHD	MagnetoHidroDinámica
FFT	Transformada rápida de Fourier (Fast Fourier Transform)
FMM	Fast Multiple Method
FEM	Método de elementos finitos (Finite Elements Method)
SEM	Método de elementos espectrales (Spectral Elements Method)
FDM	Método de diferencias finitas (Finite Difference Method)
SDM	Método de diferencias espectrales (Spectral Difference Method)
SVM	Método de volúmenes espectrales (Spectral Volume Method)
MoM	Método de los momentos (Method of Moments)
BEM	Método de los elementos de contorno (Boundary elements Method)
LBM	Método de Lattice Boltzmann (Lattice Boltzmann Method)
LGM	Método de Lattice Gas (Lattice Gas Method)
SPH	Método numérico (Smoothed Particle Hydrodynamics)
PIC	Método numérico (Particle in Cell)
ECH	Electron Cyclotron Heating
NBI	Inyección de partículas neutras (Neutral Beam Injection)
DKES	Código de simulación (Drift Kinetic Equation Solver)
CG	Método iterativo de inversión (Conjugated Gradients)
Bi-CGStab	Método iterativo de inversión (Biconjugated Stabilized gradients)
GMRES	Método iterativo de inversión (Generalized Minimum Residual)
LCFS	Ultima superficie de flujo cerrada (Last Closed Flux Surface)
SOL	Scrape-off layer

API	Interfaz de programación de aplicaciones (Application Programming Interface)
MPI	Interface de paso de mensajes (Message Passing Interface)
CPU	Unidad central de procesamiento (Central Processing Unit)
FORTRAN	Lenguaje de programación
C	Lenguaje de programación
C++	Lenguaje de programación
BASIC	Lenguaje de programación
CAVE	Plataforma de visualización virtual (Cave Automatic Virtual Environment)
TJ-II	Dispositivo de experimentos de confinamiento magnético del tipo Stellarator
ITER	Reactor experimental de fusión en construcción (International Thermonuclear Experimental Reactor)

Capítulo 1

Introducción

1.1. Introducción a la física básica de plasmas de fusión

El confinamiento magnético se presenta como uno de los métodos más prometedores a la hora de explotar, de forma rentable, la energía de fusión. Como es bien sabido, si dos núcleos ligeros desprovistos de sus capas electrónicas (completamente ionizados) colisionan entre sí apropiadamente, el resultado es la fusión de ambos núcleos en uno de número atómico mayor: es la (tan deseada en otros tiempos) transmutación. Puesto que el núcleo atómico resultante posee menos masa que la suma de los reactivos, la reacción es tremendamente exotérmica, siendo la energía del producto resultante $\Delta E = \Delta mc^2$. Dicha reacción será más o menos eficiente en función del número atómico de los núcleos que colisionan [1].

El gran problema es cómo mantener los núcleos atómicos totalmente ionizados y a las altas temperaturas requeridas (en torno a los 10 keV). Se puede conseguir su confinamiento utilizando un intenso campo magnético como “botella magnética” responsable del aislamiento de las paredes. Si el aislamiento es bueno, basta con suministrar al combustible energía de forma continuada para poder alcanzar las temperaturas deseadas y, una vez alcanzadas las condiciones de trabajo, el responsable principal del calentamiento serán las propias reacciones de fusión. En el caso de que sea totalmente responsable se dice que se ha alcanzado la ignición, pues, al igual que una cerilla, la reacción se basta de combustible (y aislamiento) para auto-sostenerse.

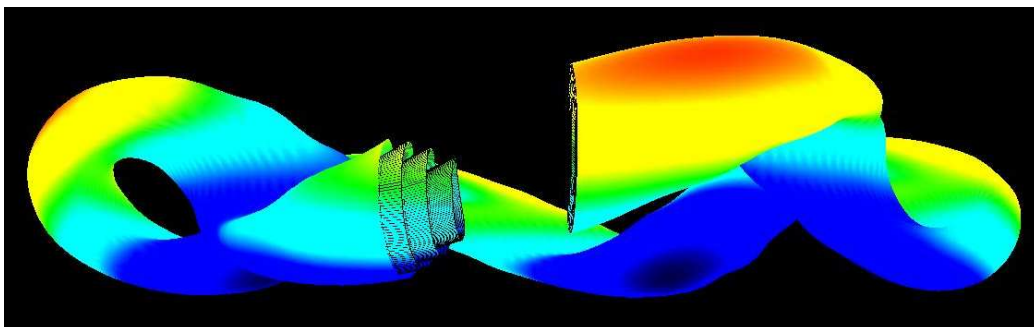


Figura 1.1: Superficies magnéticas de un dispositivo de confinamiento magnético.

El combustible a las altas temperaturas requeridas se encuentra en estado de plasma, es decir, una sopa disgregada de núcleos ionizados y electrones libres, semejante a un metal¹ pero sin red cristalina: los núcleos poseen libertad en lo que a su movimiento se refiere. Pero tal libertad se ve limitada por el hecho de que el plasma está compuesto por cargas eléctricas que, bajo situaciones complejas, pueden dar lugar a fenómenos colectivos complicados: ondas de plasma, inestabilidades, turbulencia...

Por desgracia, una de las situaciones en las que la complejidad no es desdénable resulta ser a altas temperaturas y en presencia de un campo magnético de intensidad media. Consideremos un campo magnético \mathbf{B} generado por bobinas externas que han sido diseñadas para que las líneas del campo formen superficies magnéticas toroidales anidadas (figuras 1.1 y 1.2). Esto quiere decir que, en esas superficies, al seguir una línea de campo magnético se rellena de forma densa una superficie bidimensional con topología toroidal en el espacio.

En un primer análisis del problema, el plasma debería verse confinado en presencia del campo definido, pues toda partícula cargada sigue de forma aproximada las líneas magnéticas y por tanto queda atrapada en una de las superficies. Pero los experimentos y estudios muestran que en realidad existen una infinitud de detalles a tener en cuenta. A medida que se tratan de conseguir las condiciones de trabajo requeridas para la fusión, se vuelve más y más difícil alcanzar la meta.

¹De hecho los plasma son buenos conductores eléctricos.

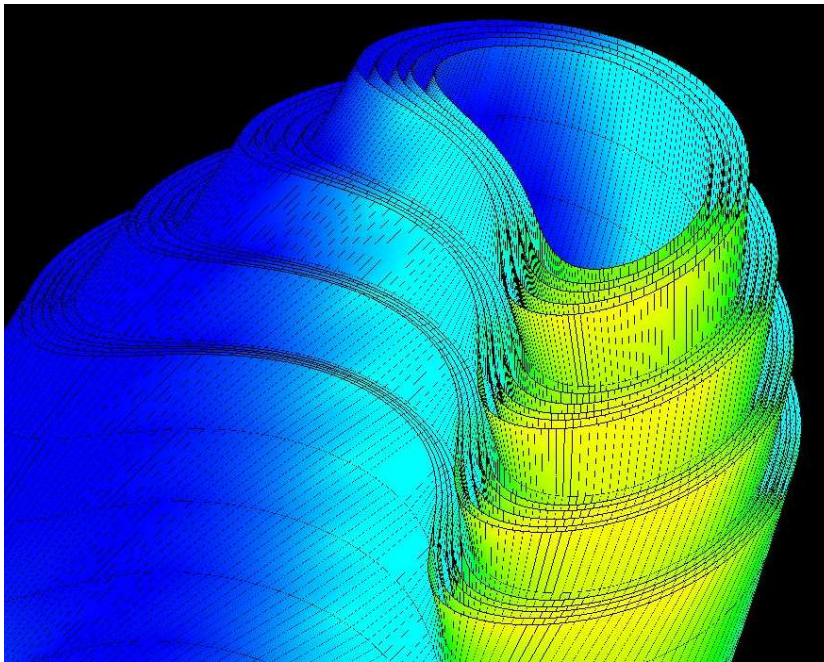


Figura 1.2: Detalle de la figura 1.1. Las superficies magnéticas están anidadas.

- En primer lugar, las “partículas” (iones o electrones) cargadas perciben a las vecinas a través del campo eléctrico generado por estas últimas. Esto provoca un fenómeno de choques estocásticos que da lugar a difusión. Así, el confinamiento pasa de ser perfecto en el sentido de que toda partícula situada en una superficie magnética permanece siempre en ella, a una situación en la que la partícula poco a poco se traslada a las superficies colindantes, y así hasta escapar del dispositivo. Este mecanismo de transporte de materia al exterior, y por tanto también de la energía asociada a ella, es el denominado transporte Clásico [2].
- Además, las partículas no siguen de forma exacta las líneas de campo, sino que poseen derivas perpendiculares que añaden un mecanismo de escape de las superficies magnéticas. El resultado es un transporte de energía significativamente mayor al Clásico: el denominado transporte Neoclásico [3].
- Sin embargo, los experimentos muestran un confinamiento mucho peor (es decir, un transporte mucho mayor) de lo que las teoría Clásica y

Neoclásica describen, por lo que se puede hablar del denominado transporte Anómalo [4] para reflejar este hecho. Los responsables de este incremento son los llamados fenómenos colectivos del plasma. Aquí entran en juego las muy rápidas perturbaciones del campo magnético generadas por el propio plasma² que dan lugar a inestabilidades y turbulencia magnética. Por otro lado el campo eléctrico, también generado por el plasma, da lugar a nuevas inestabilidades y a turbulencia electrostática.

Estos fenómenos, junto a algunos otros, dan lugar a un mecanismo de escape de energía que el plasma “aprovecha” para reducir los fuertes gradientes de presión e intentar alcanzar el equilibrio térmico con el exterior del dispositivo. El resultado es una pérdida muy significativa del buen confinamiento esperado por un análisis simplificado del problema.

La conclusión que se debe extraer es la existencia de una extensa gama de fenómenos que afectan al confinamiento. Esto es un gran inconveniente a la hora de indagar en su comprensión y el diseño de máquinas y experimentos. En la actualidad, la tendencia de la comunidad científica debido a la complejidad, parece ser un creciente interés en el desarrollo de herramientas de simulación por computador que modelice parte o, en última instancia, el conjunto de dichos fenómenos. A partir de las simulaciones, y con los resultados de los experimentos en la mano, se puede seguir la pista de qué ingredientes son más importantes para describir globalmente el problema.

Por tanto, el desarrollo de herramientas de simulación se ha convertido en pieza fundamental en la investigación en plasmas [5]. Sin embargo no es posible, con la capacidad de cómputo actual, llevar a cabo un análisis de todos los fenómenos arriba mencionados. El principal responsable es la separación de escalas temporales a tratar: las inestabilidades y la turbulencia magnética pueden aparecer en tiempos tan cortos como 10^{-10} segundos mientras que los fenómenos electrostáticos rondan las escalas de 10^{-6} segundos en los dispositivos de fusión actuales. En el otro lado de la escala se tiene el transporte Clásico y el Neoclásico en torno a 10^{-3} segundos y el tiempo de confinamiento, del orden de décimas o incluso segundos. Puesto que los algoritmos de las simulaciones requieren de una discretización temporal cuyo incremento es del orden o más pequeño que el más rápido de los fenómenos a estudiar, se comprende la primera fuente de problemas: una simulación que abarque

²Al ser un fluido conductor, pueden aparecer corrientes que generan campos magnéticos.

todos los problemas requeriría del orden de 10^{10} pasos del algoritmo de simulación. Pero no es éste el peor de los problemas pues, a medida que se indaga en la forma de simular la física, aparecen cuestiones de índole numérica tales como la inestabilidad en los algoritmos que dan lugar a fenómenos no físicos, falta de conservación en cantidades tan importantes como la energía, el número de partículas o el momento lineal, o incluso la difusividad numérica³ que estropea o enmascara el estudio del transporte de energía al exterior del dispositivo de estudio.

La presente tesis se enmarca en el desarrollo de herramientas de simulación, particularmente en la creación de un código cinético que cubra las escalas de tiempo desde 10^{-6} hasta el segundo, y tenga en cuenta el transporte Neoclásico en geometrías de campo magnético genéricas, incluyendo dispositivos tan complejos como el TJ-II [6]. Desde el punto de vista físico, la idea es poder ofrecer herramientas para estudiar propiedades tridimensionales asociadas a dicho transporte. A pesar de ser restringido en la física modelizada, visto el panorama de fenómenos arriba mostrado, la máxima que se ha intentado seguir es la de dejar siempre abierta la puerta a la inclusión de otros fenómenos. Tanto en el desarrollo teórico como en la selección de métodos numéricos e implementación se ha tenido cuidado de no imponer restricciones estrictas que impidan la introducción futura de tales añadidos. Otro de los requerimientos obligados por cuestiones prácticas es una alta eficiencia en la computación, pues de otro modo no sería posible abarcar las escalas requeridas en tiempos razonables.

1.2. Ecuaciones esenciales de transporte en plasmas confinados

La dinámica fundamental del plasma viene determinada por la función de distribución a una partícula $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ (a partir de ahora FdD). Gracias a ella, se puede conocer la densidad de probabilidad de encontrar una partícula, dada una posición en las coordenadas espaciales \mathbf{r} y de velocidad \mathbf{v} para un instante temporal t . Gran parte de la información relativa al plasma se puede obtener de ella a partir de los momentos de la FdD. Los momentos se obtienen

³Fenómeno numérico que puede ser modelizado añadiendo al problema un término artificial de difusividad.

a partir de la reducción en velocidad (integral a todas las velocidades) y los más comunes son la densidad

$$n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v,$$

y la velocidad media

$$n(\mathbf{r}, t) \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v.$$

La temperatura y presión se relacionan mediante

$$p(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{3} \int (\mathbf{v} - \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t))^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v,$$

y así con cualquier otro observable que dependa solo de la función de distribución a una sola partícula.

Dada una condición inicial para la FdD, es decir, dada una distribución inicial de partículas, es posible hallar una ecuación de evolución para la misma que ofrece, en instantes de tiempo posteriores, la nueva densidad de probabilidad. En general se puede decir, para una sola especie de partículas,

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = C(f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)),$$

donde el primer término de la izquierda está asociado a las variaciones temporales, el segundo refleja los desplazamientos o derivas asociados a las partículas y el tercero los cambios de velocidad debidos a fuerzas provenientes de campos promedio. Los campos promedio pueden ser por ejemplo magnéticos o eléctricos. Dichos campos pueden estar producidos externamente (impuestos al problema) o internamente, a través de momentos de la FdD.

El segundo miembro de la ecuación, $C(f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t))$, es el operador de colisión y tiene en cuenta las interacciones entre partículas cercanas. Dicha interacción es debida a los campos electrostáticos generados en la vecindad de las partículas⁴. Puesto que la distancia de interacción, de tipo coulombiana, es relativamente amplia, la interacción se puede describir mediante un término de difusión en el espacio de velocidades. Así, los operadores de

⁴En los plasmas, el campo eléctrico de partículas más lejanas que la denominada longitud de Debye es apantallado.

colisión asociados a plasmas de alta temperatura poseen características diferentes a las habituales de los fluidos de alta densidad. Esto modifica en gran medida los métodos utilizados para resolver la dinámica de la FdD y los resultados de la misma.

Una derivación detallada de la FdD y su ecuación de evolución para plasmas de fusión se puede encontrar en [7]. Se observará que toda la argumentación se basa en la física clásica. La razón es que las interacciones (coulombianas) que afectan a la dinámica de la FdD no involucran términos de muy corto alcance ni energías tan altas que necesiten de un tratamiento relativista. Basta con comparar las velocidades de las partículas con la de la luz⁵ para descartar correcciones relativistas y, a continuación, estimar la longitud de onda asociada a las partículas del plasma mediante la expresión $\lambda = h/\sqrt{2mE}$ para darse cuenta de lo lejos que está el sistema del ámbito cuántico. Aquí hemos usado la constante de Planck h , siendo m y E respectivamente la masa y la energía de la partícula. Incluso si se consideran los propios procesos de fusión nuclear, estos sólo aparecen como pequeñas fuentes o sumideros de especies de partículas (p. ej., desaparecen deuterones y aparecen núcleos de helio) cuya ulterior evolución sigue pudiéndose describir de manera clásica. La mecánica cuántica queda oculta en las distintas secciones eficaces (procesos de fusión, pérdidas radiativas...) de los términos fuente en general. En definitiva, el ámbito del presente estudio es netamente clásico.

Además de las cantidades asociadas a las partículas, es conveniente hablar sobre las coordenadas curvilíneas usadas para describir el sistema (Fig. 1.3):

- La coordenada toroidal ϕ es, como su propio nombre indica, la asociada al ángulo toroidal en geometría cilíndrica y varía entre 0 y 2π al dar una vuelta al toroide en torno a su eje mayor.
- La coordenada poloidal θ varía entre 0 y 2π entorno al eje menor del toro y define, junto a la coordenada toroidal, una parametrización de las superficies magnéticas.

⁵Esta discusión se refiere al ámbito del presente estudio. Hay fenómenos específicos, como la generación de “electrones fugitivos” o algunos métodos de calentamiento por radiación electromagnética, que pueden necesitar cálculos relativistas; pero en cualquier caso se trata de estudios especializados que no alteran la naturaleza “clásica” de las ecuaciones cinéticas del plasma confinado.

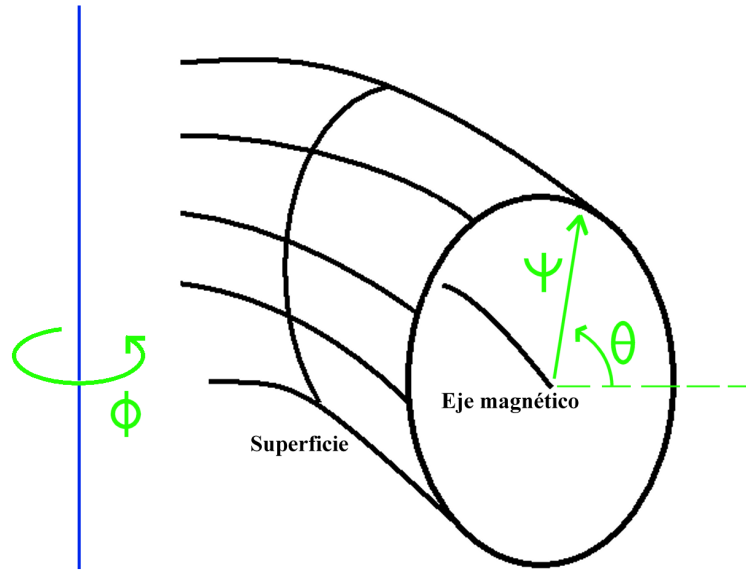


Figura 1.3: Coordenadas que caracterizan las superficies magnéticas.

- La coordenada radial ψ etiqueta las superficies magnéticas y por ello su gradiente es perpendicular en todo punto a la superficie magnética.

Si bien es cierto que hay derivas y comportamientos que obligan a las partículas a salirse de las superficies magnéticas, allí las cantidades principales del plasma tales como la densidad, la presión o la temperatura son aproximadamente constantes. Puede decirse que el campo magnético actúa de lazo conductor por las superficies y homogeneiza las propiedades del plasma sobre ellas. Es por ello que resulta conveniente hablar de cantidades promediadas a dichas superficies, en especial cuando se habla de transporte radial, pues resulta más fácil aproximar resultados integrales de las ecuaciones de evolución.

A partir de los flujos tridimensionales de partículas y calor

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{v}f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d^3v, \quad \mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) = \int \frac{mv^2}{2}\mathbf{v}f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d^3v. \quad (1.1)$$

se pueden definir los flujos radiales,

$$\Gamma(\psi, t) = \frac{\int_S \mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S}}{\int_S dS}, \quad Q(\psi, t) = \frac{\int_S \mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S}}{\int_S dS} \quad (1.2)$$

que pueden verse como algo proporcional en cada punto a $\mathbf{\Gamma} \cdot \nabla\psi$ y $\mathbf{Q} \cdot \nabla\psi$ (el factor de proporcionalidad lo da el factor de escala de la coordenada ψ).

Las cantidades definidas en este apartado son fundamentales en el estudio de plasmas [8], y serán utilizadas a lo largo de la tesis con frecuencia.

1.3. Métodos de simulación y otras cuestiones numéricas

En primer lugar se va a describir muy someramente esta extensa área: la resolución de ecuaciones provenientes de modelos físicos de plasmas mediante técnicas computacionales. Después se pasará a algunos de los problemas concretos en el área de fusión.

1.3.1. Métodos de computación

A la hora de encontrar el mejor método numérico para resolver unas ecuaciones determinadas, generalmente hay que llegar a un equilibrio entre coste computacional (recursos y tiempo necesarios para llevar a cabo la simulación) y precisión obtenida. Con suficiente capacidad de cómputo, el problema de simular un plasma sería trivial: bastaría con seguir todas las partículas del plasma (en un orden de magnitud cercano a 10^{20}), sus interacciones mutuas y con los campos externos, usando un paso temporal en el algoritmo de simulación suficientemente pequeño y una discretización⁶ de las variables suficientemente buena como para que se tenga la precisión requerida en los resultados. Pero, lógicamente, esto no es posible.

Las técnicas utilizadas dependen mucho de qué cuestiones deben ser cuidadas y cuáles no. Por ejemplo, si se requiere una conservación estricta de las cantidades a estudiar, es conveniente un método que garantice dicha conservación localmente. Los métodos de elementos discontinuos (ya se verá mas adelante en qué consisten) cumplen esta propiedad y serían los ideales en

⁶Cualquier cantidad debe de caracterizarse mediante un número de dígitos finito, en una base numérica predeterminada, para poder ser almacenado o computado.

este caso [9]. Si lo importante es una buena conservación de las cantidades, aunque no estricta, y una gran precisión y baja difusividad numérica, los métodos espectrales [10] toman un papel protagonista, con el coste añadido de un gran consumo de recursos y baja eficiencia en computadores paralelos. Si se tienen muchas dimensiones y se buscan soluciones bajo equilibrios térmicos, los métodos de Monte-Carlo son muy eficientes [11]. Vemos por tanto que es muy importante conocer los requisitos del problema.

En general, antes de elegir un método es importante conocer la capacidad de computación de la que se puede disponer y el tipo de paralelización posible. Existen métodos que no son fácilmente paralelizables, lo cual quiere decir que el algoritmo que implementa el método, al ser paralelizado de la forma más óptima posible, requiere de mucha comunicación entre los diferentes procesadores hasta tal punto que la mayoría del tiempo de ejecución se utiliza en comunicación y no en computación. Así, para una simulación dada, existe un número de procesadores por encima del cual el tiempo de computación no disminuye a medida que se añaden más procesadores, sino que aumenta. En función de cuantos procesadores sean, y de cuantos se disponga para el problema dado, el método propuesto será mejor o peor (por ejemplo un algoritmo que no escala bien con el número de procesadores a partir de 100 no tiene mucho sentido ejecutarlo en una máquina con 10000 procesadores). Por supuesto esto cambia si es necesario estudiar un modelo mediante muchas simulaciones con diferentes parámetros. En este caso cada simulación es independiente de las demás y no necesitan comunicación.

Se pueden distinguir dos grandes familias de métodos en la literatura: los estadísticos y los que discretizan la ecuación de evolución en las dimensiones del problema. Aunque existen muchas alternativas no presentadas aquí, se han mencionado sólo las más comunes. Aun así, en un último apartado se hablará de algunos métodos específicos para problemas concretos.

Métodos estadísticos

Se puede intentar seguir de forma lo más exacta posible la trayectoria de una proporción del total de partículas, teniendo en cuenta las interacciones mutuas. Esto supone un coste computacional enorme, pero a cambio se tiene toda la información del sistema si la fracción simulada es significativa. Lamentablemente, como ya se ha comentado, en plasmas de fusión con 10^{20} partículas esto no es posible.

Una solución de compromiso consiste en resolver la ecuación de Langevin [12]: se simula una pequeña porción de *marcadores* que reproducen la dinámica de las partículas, pero sin tener en cuenta el efecto de las interacciones con el resto de partículas. Para modelizar este efecto, se reúne en un operador de colisión todas las interacciones a varias partículas. Dicho operador se modela en la simulación mediante un fondo estocástico que modifica la velocidad de cada marcador. Esto se hace de modo tal que al hallar promedios estadísticos (observables) el comportamiento de éstos converge y es equivalente, en el límite de muchos marcadores, a resolver la ecuación de evolución con el operador de colisión mencionado.

En las estimaciones bajo equilibrios termodinámicos es donde son excelentes⁷ los algoritmos estadísticos; pero cuando es necesario estudiar dinámica o estados fuera del equilibrio, se pierde parte de su eficiencia. Y por desgracia los plasmas son estados fuera del equilibrio y tremendamente dinámicos.

Cabe mencionar que al elegir las condiciones iniciales hay que tener cuidado, pues podría darse el caso de dejar una parte significativa de la dinámica fuera de la “visión” de los marcadores⁸.

Una vez desarrollados los algoritmos, estos métodos se caracterizan por su sencillez de implementación y la buena estimación del error final sobre la solución. Pero poseen el inconveniente de requerir gran capacidad de computación para alcanzar soluciones con barras de error reducidas, especialmente en determinados casos patológicos pero importantes⁹.

La *eficiencia de paralelización*, que mide el aprovechamiento del hardware en función del número de procesadores, es perfecta si no hay interacción entre marcadores a través de un campo externo o promedio, pero se reduce cuando sí la hay (algo indispensable en física de plasmas). La ventaja de la sencillez de implementación se degrada considerablemente a medida que se mejora la eficiencia de paralelización en los casos de fuerte interacción.

⁷Una prueba de ello es el gran avance logrado por los algoritmos de *Metropolis* y *HeatBath* en simulaciones de ciencias de los materiales o cromodinámica cuántica [13]

⁸Por ejemplo, una zona de partículas atrapadas en un plasma puede constituir una fracción del espacio de velocidades reducida, pero su dinámica puede alterar significativamente el comportamiento global.

⁹Por ejemplo el cálculo de la velocidad toroidal de las especies en dispositivos de fusión [14].

Métodos basados en discretizar la ecuación de evolución

En función del tipo de discretización se distinguen:

- Métodos espectrales, que parten de la caracterización de las variables a resolver como expansión en una familia de funciones cuyo dominio es el recinto de estudio completo. La familia de funciones utilizada dependerá del tipo de ecuación a resolver, de las condiciones de contorno deseadas, del recinto de estudio etc. Desde un punto de vista algebraico, en general estos problemas requieren la resolución de sistemas de ecuaciones con un número de variables del orden del número de elementos en la familia de funciones. Además, las matrices que caracterizan tales sistemas de ecuaciones suelen ser “densas” (la gran mayoría de sus elementos son no nulos), lo cual requiere un trabajo de resolución muy grande para altas precisiones. Un problema añadido es un número de condición de dichas matrices alto¹⁰, lo cual dificulta el hallar soluciones mediante los denominados *solvers* iterativos¹¹. Otro problema adicional es la baja eficiencia a la hora de paralelizar.

Dentro de los métodos espectrales [15] se encuentran el método de los momentos (MoM) [16], Expansiones en familias tales como Fourier, Laplace, Laguerre, Hermite, métodos pseudoespectrales que aprovechan la eficiencia de transformaciones rápidas tales como FFT (transformada rápida de Fourier) [17] o FMM (*Fast Multipole Method*) [18] para resolver un problema etc.

En general, en la comunidad científica, los métodos espectrales se usan asiduamente por su claridad en los resultados y precisión. Pero tienen como grandes enemigos la eficiencia en máquinas masivamente paralelas y la dificultad de encontrar familias de funciones adecuadas a recintos complicados.

- En el otro extremo de la balanza se tienen métodos de elementos que aproximan la función mediante funciones de bajo orden en recintos que son mucho menores que el de estudio. Cada uno de los pequeños recintos en los que tiene vigencia una de estas aproximaciones se denomina

¹⁰El número de condición indica la relación entre el mayor y el menor de los autovalores de una matriz dada.

¹¹Un tipo de algoritmo que permite hallar una solución aproximada a un sistema sin tener que invertir de forma directa la matriz.

elemento. Por tanto, la función puede ser aproximada mediante numerosos elementos y dentro de cada elemento por una aproximación de bajo orden. A medida que crece el número de elementos, se incrementa la precisión. La obtención de una solución suele limitarse, una vez más, a resolver un sistema de ecuaciones caracterizado por matrices. Dichas matrices suelen ser “dispersas” (un gran número de los valores que las componen son nulos) y esto supone una ventaja tanto para la paralelización como para la resolución mediante *solvers* iterativos. El número de condición de las matrices depende del problema de estudio, pero en general se comportan mejor que el equivalente espectral. También es cierto que el número de elementos necesarios para alcanzar una precisión dada es mayor que en el caso de los métodos espectrales pero, si se dispone de una máquina masivamente paralela para el cálculo, a efectos prácticos, un método espectral es menos eficiente (en el sentido del tiempo requerido para obtener una precisión dada).

Dentro de esta gama de métodos [19] entrarían los de elementos finitos (FEM), volúmenes finitos (FVM) y otras variedades. También existe el método de las diferencias finitas (FDM) que, si bien no tiene elementos bien caracterizados, se basa en el mismo principio de aproximar las variables por funciones locales y no globales.

Como ya se ha comentado, la eficiencia de paralelización suele ser buena. El hecho de ser los métodos más utilizados en aplicaciones de ingeniería hace que se haya invertido mucho esfuerzo y tiempo en mejorarlos (soluciones con precisión variable dentro del recinto, estimación de errores...) y adaptarlos a muchas clases de problemas, por lo que a menudo es posible encontrar software desarrollado si las ecuaciones a simular se pueden expresar de forma equivalente a otros problemas ya implementados.

- Entre ambos extremos se hallan los métodos de elementos espectrales, que utilizan familias de funciones complejas (normalmente polinomios de interpolación de alto orden) y elementos al mismo tiempo: el recinto de estudio se divide en elementos de geometría más simple y, dentro de cada uno, se utiliza una familia de funciones para alcanzar una precisión espectral. La unión entre recintos se hace de modo que, globalmente, no se pierda la precisión alcanzada dentro de cada recinto. Si se toma un alto orden en la familia de funciones y solo un elemento para ca-

racterizar el recinto de estudio se tienen los métodos espectrales. En el otro extremo, bajo orden en la familia y gran número de elementos, se tienen los métodos tales como FEM. Los métodos de elementos espectrales son relativamente jóvenes dentro del panorama numérico. No obstante, poco a poco están ganando terreno y convirtiéndose en una fracción importante de la literatura. Esto es debido a su flexibilidad a la hora de abordar problemas, por ejemplo, debido a la capacidad de incorporar al mismo tiempo zonas con elementos de orden alto y otras de orden bajo (esto es útil en simulaciones muy inhomogéneas donde en una parte del recinto la solución sea fácilmente interpolable y resoluble pero en otra requiera gran precisión).

Dentro de los métodos de elementos espectrales se tiene la versión clásica (SEM) [20] pero también otras más nuevas como el método de Galerkin discontinuo (DGM) [21], el método de los volúmenes espectrales (SVM, que es la contrapartida de volúmenes finitos) [22] o el método de las diferencias espectrales (SDM, que es la contrapartida al método de las diferencias finitas) [23].

La eficiencia de paralelización en los métodos de elementos espectrales depende del orden dentro de cada elemento y del número de elementos, y por tanto depende de la arquitectura de hardware disponible. En cualquier caso, abarca los dos extremos estudiados más arriba (códigos espectrales - códigos de elementos)

Métodos específicos

Hasta aquí se han mostrado los métodos numéricos convencionales, pero existe otra infinitud más específica. Un ejemplo es el método de los elementos de contorno (BEM) [24] donde el recinto de estudio se supone compuesto por volúmenes con propiedades homogéneas separados por discontinuidades. Existen también mezclas entre métodos de partículas y continuos tales como los *meshless*¹² [25] donde entrarían por ejemplo SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*)[26]; los métodos PIC podría entrar dentro de esta categoría. Una gama importante que tal vez en un futuro tenga algo que decir en el ámbito de la fusión es LBM o el método de Lattice Boltzmann [27].

El LBM en cierto modo se puede ver como un método de partículas o trazadores: si se toman partículas a velocidades muy específicas que cum-

¹²Sin malla.

plen determinadas propiedades y se hacen evolucionar en el tiempo se tiene el algoritmo básico del LBM. La particularidad de las velocidades consiste en que, en su conjunto, el problema de avance de las partículas equivale a resolver las ecuaciones para los momentos de orden más bajo de la ecuación de Boltzmann. Dichos momentos provienen de una integral en velocidad. Si la integral se lleva a cabo de forma numérica mediante cuadraturas de Gauss, es equivalente a la suma ponderada de la FdD en determinadas velocidades que coinciden con las que se hacen avanzar por LBM. Por tanto, el LBM equivale a evolucionar marcadores de la FdD que serán usados en cuadraturas de Gauss para obtener las ecuaciones de los momentos de orden más bajo (densidad, velocidad, temperatura). Además la eficiencia del LBM es muy grande, pues la cuadratura se elige de tal modo que la convección por cada paso temporal de los marcadores consista tan solo en desplazarlos de su posición actual a una de las vecinas en una rejilla. Así el algoritmo de LBM consiste en pasos de convección y colisión sucesivos cuya eficiencia permite simular tiempos muy largos.

Los modelos de retícula tipo LBM inicialmente se utilizaban sólo para resolver casos sencillos de las ecuaciones de Navier-Stokes en condiciones muy restringidas, pero han conseguido ser aplicados en campos cada vez más cercanos a los problemas relevantes para la fusión, como por ejemplo problemas de MHD [28], resolución del potencial electrostático [29], electromagnético [30] e incluso la turbulencia electrostática [31].

Propiedades conservativas

Además de la separación en función de la discretización del problema, es importante otra caracterización en base a propiedades de conservación. Existen casos donde se requiere una conservación estricta de las cantidades de estudio con precisión equivalente a la de la discretización binaria de la plataforma hardware. Un ejemplo son los casos donde los tiempos de estudio son mucho mayores que el paso utilizado en el algoritmo de integración temporal: un error pequeño en la conservación de cantidades tales como la energía o el número de partículas puede llevar en última instancia a soluciones disparatadas e incluso inestabilidades. Por tanto aquí resulta esencial que el método numérico, por construcción, no permita la “variación de los invariantes”.

Los métodos de partículas, si están bien diseñados, deben mantener los invariantes como tales, pues todas las propiedades de cada partícula depen-

den del modelo que se utilice para ella. Los métodos espectrales no son estrictamente conservativos, pero el error en la conservación es muy pequeño debido a la alta precisión. En el otro lado, los métodos de elementos y los de elementos espectrales, pueden o no ser conservativos. Para poder tener dicha capacidad deben aprovechar el hecho de que las variables a modelizar se aproximan por funciones diferentes en cada elemento del recinto y, por tanto, se pueden introducir discontinuidades entre elementos vecinos. Dichas discontinuidades deben tratarse apropiadamente para garantizar la conservación. Así, por ejemplo, los métodos FVM, DGM, SVM y SDM son a la vez discontinuos y conservativos.

1.3.2. Métodos utilizados en el área de fusión

El mundo de la computación en el área de fusión por confinamiento magnético es un entramado complejo de códigos que simulan diferentes aspectos de la física y que tratan de abarcar la dinámica en todas las escalas temporales posibles. Dicha extensión puede sin embargo escindirse en varias áreas de trabajo más o menos diferenciadas que se van a introducir aquí.

Como ya se ha comentado, la descripción completa de la FdD requiere de un escalar definido en un espacio de 6 dimensiones. Los códigos PIC [32] se utilizan en las aplicaciones que requieren toda la información cinética de la función de distribución, y el campo eléctrico generado por todas las partículas simuladas. En esencia consisten en evolucionar la mayor proporción posible de las partículas del plasma y calcular el campo eléctrico (y magnético) en cada paso. La estimación de los campos es la parte más costosa y suele acelerarse mediante técnicas *Multigrid* [33]. En general este tipo de códigos se restringe a situaciones sencillas donde, para reducir el problema, se explotan simetrías en algunas de las dimensiones. Así por ejemplo se puede hablar de un problema 2+2 donde solo se tienen en cuenta dos dimensiones espaciales y dos en velocidad.

En el momento actual, no es posible simular la evolución de las inestabilidades y turbulencia magnéticas (los fenómenos más rápidos) teniendo en cuenta todos los detalles de la FdD en 5 ó 6 dimensiones durante tiempos suficientemente largos como para resultar de utilidad. Es por ello que, al estudiar estos fenómenos, se utiliza la aproximación MHD [34]. Ésta tiene en cuenta, al igual que para un fluido convencional, tan solo los momentos más

importantes de la FdD tales como: densidad, velocidad, temperatura, flujo de calor, viscosidades... Las ecuaciones deben tener un cierre correcto de los momentos. Desde un punto de vista computacional, esto equivale a resolver ecuaciones integrodiferenciales no lineales acopladas:

- Acopladas porque los momentos dependen los unos de los otros.
- No lineales en su parte convectiva por usar la expansión en momentos. Además, el hecho de que las velocidades de convección dependan de los campos magnéticos y eléctricos que, a su vez, dependen del estado del plasma, es otra fuente de no linealidad.
- Son integrales por que los campos magnético y eléctrico en cada punto dependen del estado global de todas las partículas del plasma.

Habitualmente se trabaja con códigos que aproximan la función de distribución con funciones analíticas de mayor o menor complejidad. Puesto que se requiere gran precisión, es habitual trabajar con métodos espectrales, pero también con FEM, SEM o FDM o mezclas de éstos últimos en la coordenada radial y espectrales dentro de la superficie magnética. Un ejemplo de código se encuentra en [35].

Subiendo en la escala temporal, se tiene la turbulencia electrostática [36, 37] que muestra un panorama parecido al de MHD. Se tienen ecuaciones aproximadas para los momentos de la función de distribución que deben ser resueltas en presencia de un campo magnético y otro eléctrico. Pero ahora se tiene la diferencia esencial de que el campo magnético se supone fijado y por tanto no existen perturbaciones magnéticas. No ocurre lo mismo con el campo eléctrico. Una dificultad añadida es la incursión de algunas propiedades cinéticas de la función de distribución que no son correctamente modelizadas por los modos más bajos y que deben ser tenidos en cuenta a través de modelos teóricos adicionales [38]. Sin embargo, para simplificar el problema, en las escalas temporales implicadas es posible aplicar la condición de cuasineutralidad. Aplicar cuasineutralidad equivale a suponer que la separación de carga es despreciable en cada punto. Con ello, resolver el problema del potencial se simplifica de un problema integral (no local), en el que cada punto requería “ver” todo el resto del plasma para estimar el campo eléctrico, a un problema local en el que el potencial puede describirse mediante una ecuación diferencial que cumple que el plasma se comporta de

tal modo que la densidad de iones es igual a la de electrones en todo punto del plasma.

Así, si bien en parte es necesario tener en cuenta algunas características cinéticas de la función de distribución, se relajan las exigencias computacionales al limitarse ahora el cálculo a ecuaciones acopladas diferenciales no lineales.

En estudios de turbulencia electrostática es común trabajar con métodos espectrales [39].

A un nivel todavía más alto en la escala temporal, se tienen los códigos de transporte [40]. En general, limitan el número de dimensiones espaciales a una: la coordenada radial. Esto permite alcanzar las escalas temporales del confinamiento de la máquina y así ofrecer las contrapartidas teóricas de los perfiles medidos en los experimentos. No obstante, por el camino se ha perdido gran parte de la física debido al número de aproximaciones llevado a cabo. El resultado es que los términos de transporte de estos códigos pueden tener diferentes enfoques o propósitos:

- Códigos derivados a partir de modelos de teoría neoclásica, limitados a geometrías no muy complejas bajo condiciones de trabajo restringidas que están lejos de las experimentales. A pesar de la simplicidad de la geometría y las restricciones, detrás se esconde una tremenda complejidad teórica para obtener las soluciones. A cambio, se alcanza una comprensión profunda de los fenómenos que hay detrás [8].
- Por otro lado, un código de transporte puede utilizarse de manera interpretativa e incluir términos que provienen de los experimentos para hallar los perfiles de conductividad térmica o flujos de calor, etc. Igualmente se pueden incluir perfiles de otras simulaciones mucho más detalladas pero que no pueden alcanzar las escalas de tiempo requeridas para ofrecer datos de estacionarios (a tiempos de transporte).
- También pueden ser modelos matemáticos que buscan ahondar en la estructura de las propias ecuaciones de transporte con objeto de explicar algunos de los extraños comportamientos de la dinámica de plasmas, como la aparente no localidad del transporte, o la autorregulación de los gradientes de los perfiles termodinámicos [41].

Al ser problemas en general de una dimensión, las exigencias computacionales no son tan altas¹³ como en otras áreas. Es común trabajar con métodos básicos o semi-analíticos.

Al margen de lo anterior, en la actualidad están surgiendo códigos que tienen en cuenta las 5 dimensiones de la FdD bajo la aproximación de centro guía. Su ámbito de estudio abarca: casos de muy baja colisionalidad, fenómenos colectivos que requieran tener en cuenta dinámicas muy diferentes, situaciones en las que las condiciones de trabajo son extremas¹⁴... En estos casos una expansión en pocos momentos no es correcta y hay que tener en cuenta las propiedades cinéticas de la FdD. En general, estos códigos trabajan con el campo magnético fijado. El campo eléctrico puede establecerse a partir de una ecuación de cuasineutralidad de carga. Debido al alto número de dimensiones, suelen ser códigos de trazado de partículas o marcadores, como por ejemplo [42]. No obstante, existen también códigos continuos [43] (es decir que aproximan la función de distribución no como un conjunto de partículas sino como una interpolación más o menos compleja de funciones analíticas en 5 dimensiones).

Una extensión de la anterior situación se da cuando la aproximación de centro guía no es suficiente y se hace necesario tener en cuenta correcciones a la misma: son los denominados códigos girocinéticos [44, 45, 46, 47, 48] que, se podría decir, son capaces de caracterizar la función de distribución en un espacio de entre 5 y 6 dimensiones, pues tienen en cuenta parte de la variación de la función de distribución con el ángulo de giro de Larmor (la sexta dimensión en la que se supone simetría bajo la aproximación de centro guía). Si se descarta la evolución del campo magnético, posiblemente éstos son los códigos que mejor consideran la dinámica. Solo es necesario acudir a este detalle en la descripción cuando se requiere tener en cuenta dinámica de escalas espaciales pequeñas en comparación con el radio de Larmor, o variaciones muy rápidas en el tiempo, en comparación con el tiempo de giro de Larmor. Ejemplos de ello son la microturbulencia en el fluido electrónico, estudios con gradientes muy abruptos o en el estudio partículas con gran radio

¹³Si bien es cierto que algunos de los modelos son complejos en su resolución, no es en general un problema de capacidad de cómputo. Cuestión aparte son los términos fuente que pueden requerir un tratamiento costoso de por sí, como sucede con las fuentes de calentamiento o partículas, la radiación, etc.

¹⁴Por ejemplo debido a una fuente que afecta sólo a zonas localizadas de la función de distribución, tal y como el calentamiento por resonancia ciclotrónica.

de Larmor como los iones pesados o las partículas muy energéticas. Computacionalmente, puede tratarse de códigos continuos, PIC, de marcadores, etc.

Hasta aquí, se han pincelado algunas de las grandes áreas de computación en física de plasmas. No obstante, existen modelos que tienen en cuenta otros problemas no mencionados, tales como cuestiones relativistas, partículas neutras, múltiples especies, radiación, intercambio de carga, inestabilidades... Además puede haber solapamientos entre varias de las áreas mencionadas, donde algunos de los códigos pueden llegar a adentrarse en las áreas vecinas. Por ejemplo, los códigos de turbulencia electrostática están llegando ya a escalas de transporte, o los de turbulencia magnética al régimen de los electrostáticos e incluso un poco más allá.

Desde el punto de vista computacional, existen áreas “exóticas” que tratan de usar métodos tales como el LBM y otros no convencionales para describir la evolución del plasma.

Como se puede imaginar, todo esto convierte el problema en una tarea formidable que roza lo computable aún con la enorme capacidad actual y que, día a día, no para de evolucionar.

El código presentado en esta tesis se basa para su discretización espacial en un método de elementos espectrales, en concreto SDM. La elección viene dada por la complejidad de las geometrías espaciales a estudiar, por la conservación local que ofrece dicho método y por las buenas características computacionales. Otro motivo para seleccionar SDM es la eficiencia de paralelización. En las coordenadas de velocidad se lleva a cabo una expansión espectral que permite alcanzar una alta precisión a la hora de obtener momentos de la FdD. En concreto, estos últimos vendrán dados por combinaciones lineales de unos pocos modos de la expansión espectral en velocidad.

1.4. Objetivos y planificación

Para el importante problema del estudio de plasmas de fusión por confinamiento magnético, se hace indispensable disponer de herramientas de simulación que estudien la dinámica global de las cantidades más significativas, tales como perfiles de densidad, temperatura o corriente. En la presente tesis se introduce una herramienta desarrollada a tales efectos, que nace con la intención de aprovechar los nuevos recursos informáticos disponibles y las ar-

quitecturas de supercomputación actuales. El objetivo principal del código es estudiar fenómenos de transporte tridimensional en máquinas con geometrías complejas, tales como el TJ-II. De las características concretas del método, tan solo se menciona por ahora que se utiliza SDM para la discretización espacial de la función de distribución.

En los siguientes capítulos se introducirán poco a poco el modelo concreto que se tomará (capítulo 2), algunas cuestiones numéricas incluida la discretización espacial (capítulo 3), comprobación del código en máquinas de geometría sencillas del tipo *tokamak* (capítulo 4) y algunos resultados preliminares en geometrías complejas (capítulo 5). Igualmente se darán algunos detalles de la codificación (capítulo C), conclusiones y apéndices aclaratorios.

Una cuestión que no se ha despreciado es la representación de resultados, pues no siempre es sencillo trabajar con modelos en tres dimensiones, ya sean los mallados necesarios para representar la geometría, resultados etc. De hecho, una visualización rápida de resultados ha demostrado ser útil a la hora de detectar fallos o incongruencias, que de otro modo podría llevar tiempo encontrar. Por ello, se incluye un apéndice específico (apéndice D) sobre una plataforma avanzada de visualización estereográfica que ha sido implementada dentro de esta tesis, tanto en su parte software como hardware.

Referencias

- [1] T. J. Dolan, *Fusion Research. Principles, experiments and technology*, Pergamon Press, ISBN 0-08-025565-5, (2000).
- [2] R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 1. Classical transport theory*, North Holland (1988).
- [3] S. P. Hirshman, D. J. Sigmar, *Neoclassical transport of impurities in Tokamak plasmas*, Nucl. Fusion **21**, 1079 (1981).
- [4] P. C. Liewer, *Measurements of microturbulence in Tokamaks and comparisons with theories of turbulence and anomalous transport*, Nuc. Fusion, **25**, 543 (1985).
- [5] W. M. Tang, V. S. Chan, *Advances and challenges in computational plasma science*, Plasma Phys. Control. Fusion, **47**, R1 (2005).
- [6] C. Alejaldre *et al.*, *TJ-II Project: A flexible Helic Stellerator*, Fusion Technol. **17**, 131 (1990).
- [7] R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 1. Classical transport theory*, North Holland (1988).
- [8] F. L. Hinton, R. D. Hazeltine, *Theory of plasma transport in toroidal confinement systems*, Rev. Mod. Physics **48**(2), 239 (1976).
- [9] J. A. Ekaterinaris, *High-order accurate, low numerical diffusion methods for aerodynamics*, Progress in Aerospace Sciences, **31**, 192 (2005).
- [10] J. A. Ekaterinaris, *High-order, low numerical diffusion methods for aerodynamics*, Progress in Aerospace Sciences, **41**, 192 (2005).

-
- [11] M. Creutz, *Quarks, Gluons and lattices*, Cambridge Monographs on mathematical physics, ISBN 0-521-31535-2 (1990).
- [12] A. Boozer, G. Kuo-Petravic, *Monte Carlo evaluation of transport coefficients*, Phys. Fluids, **24**(5), 851 (1981).
- [13] D. J. Amit, V. Martín-Mayor, *Field Theory, the renormalization group and critical phenomena*, word scientific publishing, ISBN: 981-256-109-9, (2005).
- [14] K. Allmaier, S.V. Kasilov, W. Kernbichler, G.L. Leitold and J.L. Velasco, *δf Monte Carlo computations of neoclassical transport in stellarators with reduced variance*, 35th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Crete, 2008.
- [15] J. S. Hesthaven, S. Gottlieb, D. Gottlieb, *Spectral Methods for Time-Dependent Problems*, Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge University Press ISBN 978-0521792110, (2007).
- [16] W. C. Gibson, *The Method of Moments in Electromagnetics*, Chapman & Hall/CRC, ISBN 978-1-4200-6145-1, (2008).
- [17] <http://mathworld.wolfram.com/FastFourierTransform.html>
- [18] L. Greengard, V. Rokhlin *A fast algorithm for particle simulations*, J. Comput. Phys., **73**(2), 325 (1987).
- [19] T. J. Chung, *Computational Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, ISBN 0-521-59416-2, (2002).
- [20] J. Tromp, D. Komatitsch, Q. Liu, *Spectral-Element and adjoint methods in seismology*, Comm. Comput. Phys., **3**(1), 1 (2008).
- [21] B. Cockburn, C. W. Shu, *Runge-Kutta Discontinuous Galerkin Methods for convection-dominated problems*, J. Scient. Comput. **16**(3), 173 (2001).
- [22] Z.J. Wang, *Spectral (finite) volume method for conservation laws on unstructured grids: basic formulation*, J. Comput. Phys., **178**, 210 (2002).

- [23] Y. Liu, M. Vinokur, Z. J. Wang, *Discontinuous spectral difference method for conservation laws on unstructured grids*, Proceedings of the 3rd International Conference on Computational Fluids Dynamics, Toronto, Canada, July 12-16, (2004).
- [24] L. C. Wrobel, M. H. Aliabadi *The Boundary Element Method*, Wiley. ISBN 0-470-84139-7, (2002).
- [25] T.P. Fries, H. G. Matthies, *Classification and overview of meshfree methods*, Informatikbericht Nr. 2003, July, (2004).
- [26] L.B. Lucy, *A numerical approach to the testing of the fission hypothesis*, Astron. J., **82**, 1013 (1977).
- [27] McNamara and G. Zanetti, *Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata*, Phys. Rev. Lett., **61**, 2332 (1988).
- [28] X. W. Chen, S. Bao-Chang, *A new Lattice Boltzmann model for incompressible magnetohydrodynamics*, Chin. Phys., **14**(7), 1398 (2005).
- [29] A.C. Maggs, V. Rossetto, *Local simulation algorithms for Coulomb interactions*, Phys. Rev. Lett., **88**(19) 196402 (2002).
- [30] M. Zhang, D. Cule, L. Shafai, G. Bridges, N. Simons, *Computing electromagnetic fields in inhomogeneous media using Lattice Gas Automata*, Symposium on Antenna Technology and Applied Electromagnetics, Ottawa, Canada, 14-16 Agosto (1998).
- [31] G. Fogaccia, R. Benzi, F. Romanelli, *Lattice Boltzmann algorithm for three-dimensional simulations of plasma turbulence*, Phys. Rev. E, **54**(4), 4384 (1996).
- [32] C. K. Birdsall, A. B. Langdon, *Plasma physics via computer simulation* Institute of Physics, Series in Plasma Physics, Taylor & Francis, ISBN 0-7503-1025-1 (2005).
- [33] A. Brandt, *Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems*, Math. Comp, **31**, 333 (1977).
- [34] P. A. Davidson, *An introduction to Magnetohydrodynamics*, Cambridge text in applied mathematics, Cambridge University Press, ISBN 0-521-794870 (2001).

- [35] L. García, B.A. Carreras and V.E. Lynch, *Spatiotemporal structure of resistive pressure-gradient-driven turbulence*, Phys. of Plasmas, **6**, 107 (1999).
- [36] A. Hasegawa, K. Mima, *Pseudo-three-dimensional turbulence in magnetized nonuniform plasma*. Phys. Fluids **21**, 87 (1978).
- [37] X. Garbet, *Introduction to drift wave turbulence modeling*, Transactions of fusion science and technology, **45**, 354 (2004).
- [38] P. H. Diamond, H. Biglari, *Theory of Dissipative Trapped-Ion Convective-Cell Turbulence*. Phys. Rev. Lett. **65**, 2865 (1990).
- [39] D. E. Newman, P. W. Terry, *Energy transfer dynamics of dissipative trapped ion convective cell turbulence*, Phys. Fluids B **4**(3), 599 (1992).
- [40] J. P. H. E. Ongenal, M. Evrardl, D. McCune, *Numerical transport codes*, Trans. Fusion Sci. Tech **49**, 337 (2006).
- [41] R. Balescu, *Statistical Dynamics: Matter Out of Equilibrium*, Imperial College Press , pp. 350 (1997).
- [42] F. Castejón, L.A. Fernández, J. Guasp, V. Martín-Mayor, A. Tarancón, J.L. Velasco, *Plasma Physics and Controlled Fusion* **49** 753, (2007).
- [43] E.A. Belli, J. Candy, *Kinetic calculation of neoclassical transport including self-consistent electron and impurity dynamics* Plasma Phys. Control. Fusion **50**, 095010, (2008).
- [44] T. Dannert, F. Jenko, *Gyrokinetic simulation of collisionless trapped-electron mode turbulence*, Phys. Plasmas, **12**, 072309 (2005).
- [45] A.M. Dimits, W.M. Nevins, D.E. Shumaker, G.W. Hammett, T. Dannert, F. Jenko, M. J. Pueschel, W. Dorland, S. C. Cowley, J. N. Leboeuf, T. L. Rhodes, J. Candy and C. Estrada-Mila, *Gyrokinetic simulations of ETG and ITG turbulence*, Nucl. Fusion **47**, 817 (2007).
- [46] V. Grandgirard, M. Brunetti, P. Bertrand, N. Besse, X. Garbet, P. Ghendrih, G. Manfredi, Y. Sarazin, O. Sauter, E. Sonnendruher, J. Vaclavik L. Villard, *A drift-kinetic Semi-Lagrangian 4D code for ion turbulence simulation*, J. Comput. Phys., **217**, 395 (2006).

-
- [47] J.A. Heikkinen, S. Henriksson, S. Janhunen, T. P. Kiviniemi, F. Ogan-
do, *Gyrokinetic simulation of particle and heat transport in the presence
of wide orbits and strong profile variations in the edge plasma*, *Contr.
Plasma Phys.*, **467** 490 (2006).
- [48] G. Jost, T. M. Tran, W. A. Cooper, L. Villard, and K. Appert, *Global
linear gyrokinetic simulations in quasi-symmetric configurations*, *Phys.
Plasmas* **8**, 3321 (2001).

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

En este capítulo se detallan los fundamentos teóricos y, con objeto de aclarar la conexión entre la teoría y el cálculo, se introduce lo esencial del método numérico. Tras una breve introducción al modelo, en la sección 2.2 se describe el problema que se desea resolver: la ecuación cinética del centro guía. Aquí se prepara la ecuación para su posterior resolución, en coordenadas espaciales cartesianas y de energía cinética normalizada y ángulo de ataque en la velocidad; y se introduce el operador de colisión, tomado de la bibliografía y que se adapta muy bien a nuestro tratamiento de la función de distribución. En la sección 2.3 se explica la forma en que la función de distribución es expresada, su expansión en polinomios ortogonales clásicos y algunas de sus características. A continuación se describe el tratamiento de la temperatura en torno a la cual se realiza la normalización: al estar cerca de una maxwelliana se supone que dicha temperatura existe y aproxima bien la función de distribución. En la sección 2.4 se explica resumidamente el método numérico, también extraído de la literatura, para la convección. Tiene la particularidad de ser localmente conservativo. Con ello se conservan las cantidades en convección hasta la precisión de la máquina de cómputo.

2.1. Introducción al modelo teórico

Como ya se ha comentado, la meta es el desarrollo de un código cinético que permita introducir geometrías de campo magnético y eléctrico con pocas restricciones y que abarque escalas temporales típicas del transporte en el plasma. Un trabajo parecido, aunque menos ambicioso debido a la limitada

potencia de cálculo disponible, se realizó con el código DKES [1]. Estas herramientas son fundamentales para aproximarse a la descripción cualitativa de los resultados experimentales y, en muchos casos, suponen un considerable apoyo para la teoría. De hecho, el transporte de energía y partículas en los dispositivos de fusión por confinamiento magnético sigue siendo un problema abierto de sumo interés: tanto el diseño como el control de un futuro reactor de fusión nuclear por confinamiento magnético deberá pasar por un conocimiento suficiente de la dinámica del plasma confinado. Hoy por hoy, este conocimiento es limitado debido a la extraordinaria complejidad del sistema físico. Aunque se puede hacer un tratamiento clásico de buena parte de la física de estos plasmas, sus característicos fenómenos colectivos dan lugar a una dinámica altamente no lineal de extraordinaria riqueza y, a la vez, dificultad para la descripción cuantitativa. Por este motivo, el cálculo numérico es una herramienta indispensable. Durante el último medio siglo se han ido haciendo sucesivas aproximaciones según la disponibilidad no sólo de recursos de cálculo, sino también de elementos teóricos. Los distintos códigos de cálculo presentes en la literatura suelen especializarse para resolver determinadas escalas espaciotemporales. Aquí pretendemos disponer de una herramienta de cálculo suficientemente flexible como para, mediante el uso de las nuevas plataformas computacionales, resolver problemas de transporte en plasmas desde primeros principios relajando las condiciones típicas de los códigos neoclásicos. A cambio, no podremos llegar al detalle de los modernos códigos cinéticos que se centran en resolver la microturbulencia.

Normalmente, cuando se trata de hacer evolucionar las ecuaciones de balance en una descripción por fluidos del plasma, el transporte se describe en base a una coordenada “radial” que simplifica notablemente el problema. En estos códigos, que podemos llamar “unidimensionales” (1-D), se explotan principalmente dos hipótesis: (i) que el campo magnético de la configuración confinadora consiste en un anidamiento de tubos vectoriales; y que (ii) las magnitudes transportadas (e.g., densidad, temperatura, momentos angulares) se distribuyen homogéneamente en sus superficies, llamadas *superficies de flujo*; de manera que las dependencias espaciales pueden reducirse a la coordenada que etiqueta cada tubo vectorial. Ésta suele ser una cantidad proporcional al flujo magnético toroidal –o su raíz cuadrada– encerrado por cada tubo de flujo. Otras elecciones son el flujo magnético poloidal o simplemente el volumen encerrado [2].

Hay muchas ocasiones en las que la condición (i) anterior no se da ni siquiera aproximadamente. Así es cuando la topología magnética de superficies

de flujo anidadas no se preserva debido a la presencia de valores racionales de bajo orden en la transformada rotacional $t = \iota/2\pi$ (véase, p. ej. [3]). Esto da lugar, en la sección transversal del tubo magnético, a la existencia de nodos y vientres asociados a islas magnéticas que rompen localmente el anidamiento. La presencia de una fuente de partículas en la zona de islas no puede ser tratada unidimensionalmente porque la zona es de medida nula en la coordenada radial. Por otro lado, el hecho es que las islas no necesariamente impiden la existencia de gradientes espaciales, convección, etc.

La condición (ii), es decir, la homogeneidad en las superficies de flujo de las magnitudes transportadas, es menos restrictiva. Desde luego, sin tal homogeneidad la interacción con las fuentes (que, en general, no tienen una distribución por superficies de flujo) daría lugar a una evolución distinta a la que se obtendría si se usaran los valores promedio en una descripción unidimensional. El ejemplo paradigmático de ruptura de homogeneidad es la turbulencia, en la que se tienen perturbaciones a las magnitudes transportadas con notable efecto en el transporte. Para evaluarlo, en la actualidad existen códigos girocinéticos que albergan todos los ingredientes para el cálculo según determinadas aproximaciones y suposiciones (véase, p. ej., las referencias [4, 5] o el artículo recopilatorio [6]). Otro nivel de descripción del transporte se centra en el efecto de las colisiones y la geometría magnética sobre los flujos de las especies del plasma. Éste es el ámbito de la teoría neoclásica, en la que se hace la aproximación básica de expresar la función de distribución mediante desarrollo perturbativo en torno a una maxwelliana. En cualquier caso, acudir a la función de distribución para describir el transporte implica acudir a los preceptos de la teoría cinética, un nivel de descripción mucho más próximo a primeros principios que las ecuaciones de fluido. El conocimiento de la función de distribución permite, mediante integración en el espacio de velocidades, obtener las magnitudes objeto del problema del transporte: las distintas magnitudes físicas del plasma y sus flujos.

El papel fundamental que desempeña la función de distribución maxwelliana en este problema puede encontrarse en numerosas referencias desde antiguo [7]. Un tratamiento completo basado en la mecánica hamiltoniana puede encontrarse en los libros [8, 9]. Hagamos aquí un breve resumen del problema para enmarcar las capacidades y limitaciones del código objeto de este trabajo. Puesto que el problema del transporte en los plasmas de fusión es altamente no lineal, para abordar el tratamiento analítico es típico echar mano de aproximaciones sucesivas. Esto requiere encontrar los parámetros

adecuados para acercarse sistemáticamente a la solución. Las escalas espacio-temporales de interés vienen dadas por la dinámica de las propias partículas, que en un campo magnético intenso se mueven en primera aproximación siguiendo órbitas helicoidales en torno a las líneas de campo magnético. Como es sabido, la proyección de este movimiento al plano perpendicular al campo da trayectorias muy parecidas a una circunferencia cuyo radio, el llamado *radio de Larmor* ρ_L , es pequeño frente a las dimensiones macroscópicas o hidrodinámicas, L_H . Éstas pueden asociarse a las escalas espaciales típicas del campo magnético –radios de curvatura, escalas del rotacional, etc.– y de las magnitudes transportadas –inversas de gradientes. Otras dos longitudes de escala fundamentales en el problema son la *longitud de Debye* λ_D , que viene a limitar la distancia a la que las interacciones electrostáticas entre las partículas es relevante; y el *recorrido libre medio*¹, λ_{mfp} , que como su nombre sugiere da idea de las distancias que puede recorrer la partícula sin sufrir interacciones con otras. Sea el parámetro $\epsilon = \rho_L/L_H$. Entonces, los plasmas que nos interesan se caracterizan por $\lambda_D \ll \rho_L \ll L_H, \lambda_{\text{mfp}}$; es decir, las longitudes L_H y λ_{mfp} son considerablemente mayores que ρ_L . Además, la propia frecuencia del giro de Larmor, $\Omega_L = qB/m$, donde q es la carga y m la masa de la partícula, y B la intensidad del campo magnético, da lugar a una escala temporal natural en la dinámica de las partículas.

La ecuación cinética que expresa la evolución de la función de distribución de las partículas –ecuación de *Liouville*– presenta una parte relacionada con su movimiento libre y otra que tiene en cuenta las correlaciones entre las partículas. Esta última parte se puede sistematizar aprovechando las escalas antes mencionadas. Lo habitual es trabajar con la función de distribución a una partícula, de manera que finalmente queda una ecuación con tres partes básicas: el propagador libre basado en el hamiltoniano del sistema, la acción de un campo medio sobre las partículas, y el término de interacciones binarias entre ellas, o término colisional, que es lo que da lugar a lo que llamamos “ecuación cinética” [10]. Aún así, el giro de Larmor complica extraordinariamente el álgebra. Sin embargo, la pequeñez del parámetro ϵ permite encontrar coordenadas en las que los coeficientes en la evolución de f no dependen –hasta el orden ϵ – de la fase del giro de Larmor. En otras palabras, se obtiene una formulación en la que es fácil promediar el rápido movimiento de giro de Larmor. En resumen, el procedimiento es como sigue:

¹En inglés “mean free path”, motivo por el que se suelen usar las siglas “mfp”.

para cada especie de partículas se expande f en función de ϵ ,

$$f = \sum_i \epsilon^i f_i \quad (2.1)$$

y se aprovecha la variedad de escalas temporales, donde la más rápida corresponde a Ω_L^{-1} , para estudiar la evolución de f en ellas. Esta escisión en diferentes escalas temporales se justifica al observar que, cuando $\epsilon \ll 1$, el movimiento de las partículas individuales puede aproximarse (orden ϵ) por el movimiento del centro guía más un giro de radio muy pequeño frente a las escalas espaciales de interés y muy rápido con respecto a las derivas del centro guía. En otras palabras, puede promediarse la parte rápidamente oscilante del movimiento sin perder la dinámica esencial para el comportamiento macroscópico. En la Ref. [2] esto se expresa comparando la frecuencia de tránsito $\omega = v_{\text{th}}/\rho_L$, definida a través de la velocidad térmica v_{th} , con la frecuencia de Larmor: se tiene

$$\epsilon = \frac{\rho_L}{L_H} = \frac{\omega}{\Omega_L} \ll 1. \quad (2.2)$$

La ecuación de evolución puede jerarquizarse entonces² considerando f como dependiente de parámetros temporales separados, $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}; t_{-1}, t_0, t_1, \dots)$ tales que $dt_i/dt = \epsilon^i$. La sustitución de f expandida en potencias de ϵ da lugar a varias ecuaciones cuyos órdenes sucesivos en ϵ se pueden tratar sistemáticamente. En particular resulta conveniente considerar que cada orden de f contiene una parte promediada a la fase del giro de Larmor, más una parte oscilante. En el orden más bajo se encuentra que f_0 no tiene parte oscilante y depende sólo de las variables de centro guía. Al estudiar las ecuaciones que debe satisfacer f_0 en estado estacionario –ecuación de evolución con t_0 – se encuentra que f_0 no varía a lo largo de las líneas de campo magnético (por lo tanto se distribuye según las coordenadas de flujo) y, muy importante, por argumentos termodinámicos resulta que f_0 debe ser una función de distribución maxwelliana cuyo tiempo de evolución característico es t_1 (es decir, su evolución es lenta en comparación con las escalas de tiempos de las derivas y mucho más lenta en comparación con las escalas de tiempo del giro de Larmor),

$$f_0 = f_0(\mathbf{x}, \mathbf{v}; t_1) \propto n_0 e^{-\frac{(1/2)mv^2}{T_0}},$$

²No se trata de la única manera de proceder. Aquí estamos resumiendo el procedimiento expuesto en la Ref. [9].

donde, necesariamente, la densidad n_0 y la temperatura T_0 evolucionan en la misma escala de tiempo y son homogéneas a lo largo de las líneas de campo magnético.

El parámetro ϵ es suficientemente pequeño en muchos casos de interés³, lo que justifica el usar una ecuación cinética de deriva siguiendo la dinámica del centro guía de las partículas. Denominaremos f^{cg} a la FdD de los centros guía, pues su dinámica es sólo una aproximación precisa hasta orden ϵ de f , la FdD para las partículas⁴. Sea la expansión $f^{cg} = \sum_i \epsilon^i f_i^{cg}$, que no debe confundirse con (2.1), expansión utilizada previamente sobre la FdD de las partículas. No siempre es inmediato⁵ llevar a cabo un ordenamiento en escalas en ϵ adecuado sobre la dinámica de f^{cg} . Por esto, y porque en el problema no lineal (con campos autoconsistentes) las correcciones a la maxwelliana pueden tener efectos drásticos en los flujos, que sea pequeño no implica necesariamente que los efectos asociados a las correcciones dadas por f_2^{cg} y superiores sean despreciables en el problema del transporte. Por ello, la ecuación resuelta por el código sí se basa en la pequeñez de ϵ (resolvemos la ecuación cinética de deriva) pero no en cortar la serie en ningún orden específico, pues el método utilizado para describir f^{cg} no se basa en una jerarquización en ϵ . Esto es una diferencia esencial con cualquier código 1-D: por consistencia con el detalle de descripción de f^{cg} en nuestro problema, no asumimos homogeneidad en las superficies de flujo –que además pueden estar “rotas”– ni estado de equilibrio local (dado por f_0^{cg}) como se hace cuando se describe el transporte en plasmas mediante las ecuaciones de fluidos. Sin embargo, la solución numérica a las ecuaciones cinéticas de deriva –habrá una por cada especie del plasma– no será completa. Si bien se ha diseñado un esquema numérico capaz, en principio, de resolver la ecuación con campos eléctricos autoconsistentes, el propósito inicial no es competir con los códigos girocinéticos específicamente diseñados para resolver la dinámica de la turbulencia. Como hemos señalado al principio, esto se debe fundamentalmente a otro requisito del código: que resuelva tiempos del orden de los tiempos de confinamiento para poder alcanzar estados estacionarios compatibles con las fuentes.

En definitiva, el código aquí introducido pretende convertirse en un puen-

³Son excepción a esto, por ejemplo, las especies iónicas muy pesadas –impurezas– o de muy alta energía cinética, como los iones de helio producto de la fusión.

⁴Puesto que el resto de la tesis tratará sobre la ecuación de centro guía, esta distinción se hará solo aquí.

⁵En el capítulo 4 se hablará más extensamente a este respecto.

te entre los mundos de la teoría neoclásica y de los códigos cinéticos, de modo que se puedan añadir o eliminar ingredientes paulatinamente para aproximarse a un extremo u otro. Esto permitirá avanzar desde la comparación directa con los resultados bien fundados de la teoría neoclásica hasta, en último caso, su acoplo a la turbulencia de longitud de onda larga. Por el camino, podrán estudiarse facetas relacionadas con las partículas atrapadas –p. ej. la corriente de *bootstrap*– y el transporte colisional; también las situaciones en las que el plasma contenga características fuertemente cinéticas, como en el borde del plasma, en los divertores, en las zonas de deposición de la potencia de calentamiento; o en general donde la geometría magnética no sea sencilla, como en el TJ-II o en cualquier equilibrio magnetohidrodinámico con islas. Concretamente, proponemos en este trabajo calcular la evolución del plasma en el espacio tridimensional mediante un código cinético capaz de resolver el transporte colisional en geometrías toroidales complejas (con aplicación al TJ-II) y cuyo esquema numérico permita introducir campos eléctricos autoconsistentes. Gran parte del método que seguiremos está basada en técnicas bien conocidas, como la de expandir la función de distribución, en cada punto espacial, en modos expresados mediante polinomios de Legendre y de Laguerre generalizados (a menudo llamados polinomios de Sonine) en torno a la función de distribución maxwelliana [11]. No obstante, por un lado, se resuelve la ecuación cinética de centro guía completa sin asumir el *ansatz* de que la perturbación de la maxwelliana es de orden ϵ , lo que permite considerar facetas del transporte asociadas a excursiones radiales de los centros guía y actualizar el fondo colisional de manera continua. Por otro lado, la forma en la que se integra con métodos numéricos, las arquitecturas de *hardware* disponibles y algunas ideas nuevas en el modelo numérico hacen que el ámbito de aplicación del código sea amplio: como se ha comentado antes, comparte facetas de los códigos de transporte neoclásico y de los cinéticos. Esto, por supuesto, supone también un alto coste computacional, pero la creciente paralelización de las máquinas de proceso casi obliga a desarrollar códigos teniendo en mente esto: un código que permita la paralelización masiva en miles de procesadores sin perder demasiada eficiencia, puede ser, después de todo, factible y práctico si se dispone de los recursos adecuados.

2.2. Ecuación de evolución

El código hace evolucionar una ecuación cinética. Como se ha comentado en la introducción, se simplifica mucho el problema considerando la función de distribución f_a de las pseudopartículas cuyo movimiento describen las ecuaciones del centro guía, lo que se conoce como *aproximación de centro guía* o teoría cinética de deriva. En esta descripción, el espacio de fase se reduce a las tres dimensiones espaciales más dos magnitudes relacionadas con la velocidad de los centros guía mediante una transformación de coordenadas del espacio de fases, como pueden ser la energía total y el momento magnético u otras elecciones [8, 9]. En nuestro caso resulta conveniente usar dos componentes de la velocidad, paralela v_{\parallel} y perpendicular v_{\perp} al campo magnético en cada punto. Por tanto, las velocidades \mathbf{v} y aceleraciones $\mathbf{a} = \mathbf{F}_a/m_a$ de cada partícula de la especie a (electrones o iones) se refieren al centro guía de su movimiento. Recordemos que, aunque las coordenadas del espacio de fase suelen ser las coordenadas espaciales y los momentos, es típico estudiar los plasmas tomando las velocidades en vez de los momentos como coordenadas [10]. La conservación del número de partículas en un elemento de volumen en el espacio de fases se expresaría, si J es el jacobiano, como $d(Jf)/dt = 0$. Si la métrica es euclídea tenemos

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f_a \mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (f_a \mathbf{a}) = \mathcal{C}_{ab} \quad (2.3)$$

donde \mathcal{C}_{ab} es el término colisional que resume las correlaciones establecidas entre las partículas debido a la interacción coulombiana. Los símbolos $\nabla_{\mathbf{x}}$ y $\nabla_{\mathbf{v}}$ se refieren respectivamente a las derivadas en el espacio de las posiciones \mathbf{x} y de las velocidades \mathbf{v} .

Por tratarse de una dinámica derivada de un hamiltoniano, la Ec. 2.3 puede expresarse también como

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_a + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_a = \mathcal{C}_{ab}, \quad (2.4)$$

pero aquí se preferirá la primera forma porque, como se verá, es más conveniente para nuestro esquema numérico.

2.2.1. Coordenadas

Vamos a trabajar con un espacio de fase en el que la parte espacial consiste en las coordenadas euclídeas, mientras que la parte cinética (el espacio de

velocidades) se despliega en cada punto en función del vector de orientación del campo magnético en ese punto, $\mathbf{b} = \mathbf{B}/|\mathbf{B}| = \mathbf{B}/B$. En términos generales, nuestra transformación puede verse en dos pasos: (i) de coordenadas euclídeas \mathbf{x}, \mathbf{v} a euclídeas en un espacio $\mathbf{x}' = \mathbf{x}$ para la parte espacial, pero a esféricas en la parte cinética, (v, φ, θ) , donde $v = |\mathbf{v}|$, $\varphi = \arccos(\mathbf{v} \cdot \mathbf{b}/v)$ y θ define la orientación de \mathbf{v}_\perp , o componente de \mathbf{v} perpendicular a \mathbf{b} ; seguida de (ii) una transformación a las coordenadas espaciales originales \mathbf{x} para la parte espacial, pero a unas nuevas coordenadas para la parte cinética, (β, λ, θ) , que definimos como:

$$\begin{aligned} v &= v_t \sqrt{\beta} \\ \varphi &= \arccos \lambda \\ \theta &= \theta \end{aligned} \tag{2.5}$$

Obsérvese que φ y θ dependen de la posición espacial \mathbf{x} porque son coordenadas relativas a $\mathbf{b}(\mathbf{x})$, pero no v ; mientras que en el sistema final, las tres coordenadas pueden depender de la posición espacial porque β se define como coordenada adimensional a través de una velocidad de referencia v_t que, en general, es un campo escalar $v_t(\mathbf{x})$. La razón para hacerlo así es que, como veremos, nuestra descripción de f como combinación lineal de funciones base resulta más fácil cuando se usa β como coordenada en vez de v o v^2 . También veremos que, en el caso particular de que f sea maxwelliana, podremos interpretar v_t como la velocidad térmica, definida precisamente como un coeficiente en la exponencial de la maxwelliana. La relación $\theta(\mathbf{r})$ no es un problema porque en la descripción de centro guía se elimina este grado de libertad. En cuanto a φ o, equivalentemente, $\lambda = \mathbf{v} \cdot \mathbf{b}/v = v_\parallel/v$, el valor concreto no es importante⁶ dado que su utilidad es que es una variable de integración apropiada. De hecho, al tratarse de la proyección normalizada sobre el campo magnético, aparece naturalmente en las expresiones de \mathbf{v} y \mathbf{a} . La única coordenada cuya dependencia con \mathbf{x} hay que tratar con cuidado es β debido a su normalización por $v_t(\mathbf{x})$. Volveremos a este asunto en las secciones 2.3 y 2.4.

⁶Se ha contemplado la posibilidad de que el tratamiento numérico necesite el uso de una función de distribución maxwelliana centrada en una velocidad paralela $V_\parallel \neq 0$, lo que implicaría tratar λ de manera análoga a β , es decir, como una función dependiente de la posición espacial. La aproximación de centro guía indica que V_\parallel es de orden ϵ y cabe esperar que las correcciones de este orden y superiores queden suplidas por las correcciones que luego haremos a una maxwelliana con $V_\parallel = 0$.

La matriz de transformación correspondiente al cambio propuesto es la composición de las dos transformaciones. Por tratarse de un espacio de fase, \mathbf{x} no depende de la parte cinética y tenemos, para la primera transformación (euclídeas \rightarrow esféricas en velocidad),

$$\mathbb{J}_{E \rightarrow V} = \frac{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})}{\partial(\mathbf{x}', v, \theta, \varphi)} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial(v, \theta, \varphi)} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

A continuación, pasemos a las coordenadas del centro guía,

$$\mathbb{J}_{V \rightarrow G} = \frac{\partial(\mathbf{x}', v, \theta, \varphi)}{\partial(\mathbf{x}, \beta, \lambda, \theta)} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \frac{\partial(v, \theta, \varphi)}{\partial \mathbf{x}} & \frac{\partial(v, \theta, \varphi)}{\partial(\beta, \lambda, \theta)} \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

y construyamos la matriz jacobiana de la transformación completa:

$$\mathbb{J}_{E \rightarrow G} = \mathbb{J}_{E \rightarrow V} \mathbb{J}_{V \rightarrow G} = \frac{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})}{\partial(\mathbf{x}, \beta, \lambda, \theta)} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial(v, \theta, \varphi)} \cdot \frac{\partial(v, \theta, \varphi)}{\partial \mathbf{x}} & \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial(v, \theta, \varphi)} \cdot \frac{\partial(v, \theta, \varphi)}{\partial(\beta, \lambda, \theta)} \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Observamos que, al mantenerse en definitiva la misma parte espacial el jacobiano de la transformación, o determinante $J_{E \rightarrow G} = |\mathbb{J}_{E \rightarrow G}|$, sólo contiene las nuevas variables Ec. 2.5.

Obtengamos explícitamente la segunda caja de la diagonal de la matriz Ec. 2.8. La transformación primera es un cambio a coordenadas esféricas:

$$\begin{aligned} v_{x'} &= v \cos \theta \sin \varphi \\ v_{y'} &= v \sin \theta \sin \varphi \\ v_{z'} &= v \cos \theta = v_{\parallel}, \end{aligned}$$

a la que corresponde un jacobiano $J_{E \rightarrow V} = v^2 \sin \varphi$. En cuanto a la transformación Ec. 2.5, tenemos

$$\frac{\partial(v, \theta, \varphi)}{\partial(\beta, \lambda, \theta)} = \begin{pmatrix} \frac{v_t^2}{2v} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{1-\lambda^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

de donde obtenemos el jacobiano de nuestra transformación total:

$$J_{E \rightarrow G} = -\frac{1}{2} v v_t^2 \quad (2.10)$$

y, en las nuevas coordenadas, el determinante del tensor métrico es

$$\sqrt{g} = \frac{1}{2}v_t^3\beta^{\frac{1}{2}}. \quad (2.11)$$

El elemento de volumen correspondiente es

$$d\mathcal{V} = \sqrt{g}d\mathbf{x}d\beta d\lambda d\theta = \frac{1}{2}v_t^3\beta^{\frac{1}{2}}d\mathbf{x}d\beta d\lambda d\theta. \quad (2.12)$$

Como hemos visto, las velocidades que pretendemos introducir en la Ec. 2.4 corresponden a las derivas del centro guía. Así, no interesa mantener la coordenada cinética θ y podemos reducir el espacio de velocidades a un plano (β, λ) teniendo en cuenta que la parte cinética del elemento de volumen queda

$$d\mathcal{V}_v = \int_0^{2\pi} \sqrt{g}d\beta d\lambda d\theta = \pi v_t^3 \beta^{1/2} d\beta d\lambda. \quad (2.13)$$

La forma de la Ec. 2.4, al presentar productos escalares de elementos covariantes y contravariantes, permite una expresión inmediata en las nuevas coordenadas,

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \nabla (f_a(\mathbf{x}, \beta, \lambda)) + \frac{d\beta}{dt} \frac{\partial f_a(\mathbf{x}, \beta, \lambda)}{\partial \beta} + \frac{d\lambda}{dt} \frac{\partial f_a(\mathbf{x}, \beta, \lambda)}{\partial \lambda} = \mathcal{C}_{ab}, \quad (2.14)$$

donde el producto escalar es euclídeo y $\mathbf{r} = (x, y, z; t)$ es la trayectoria de una partícula general, motivo por el que usamos la notación \mathbf{r} ya que \mathbf{x} se refiere a las coordenadas, que no son funciones dinámicas. Como hemos señalado antes, aquí nos es más conveniente usar la forma:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f(\mathbf{x}, \beta, \lambda)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(f(\mathbf{x}, \beta, \lambda) \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right) + \\ & \frac{1}{\sqrt{\beta}} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sqrt{\beta} f(\mathbf{x}, \beta, \lambda) \frac{d\beta}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(f(\mathbf{x}, \beta, \lambda) \frac{d\lambda}{dt} \right) = \mathcal{C}_{ab}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

tal como se obtiene al hacer la derivada covariante directamente en la Ec. 2.3 con el jacobiano 2.11. Recordemos que hay que considerar una métrica euclídea para la divergencia, que la geometría magnética de vacío es fija y que dejamos la libertad de usar distintos v_t en distintas zonas del espacio.

Antes de cerrar esta sección, retomemos el asunto de la “dependencia” espacial de β . En las transformaciones de coordenadas no hemos escrito en

ningún caso $v_t = v_t(\mathbf{x})$ porque hemos tratado v_t como una constante con dimensiones de velocidad. Veremos que, si f es maxwelliana, v_t debe ser la velocidad térmica y en un plasma como los que nos ocupan es obvio que $v_t = v_t(\mathbf{x})$. En tanto haya una variación espacial de v_t , la habrá para $\beta(\mathbf{x})$ y para cualquier magnitud que involucre β , como el elemento de volumen 2.13. Así, si hubiera que calcular un gradiente espacial de cualquier función dependiente de β , habría que considerar que

$$\frac{d}{d\mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}} + \nabla\beta(\mathbf{x})\frac{\partial}{\partial\beta} = \nabla - 2\beta\nabla\ln v_t(\mathbf{x})\frac{\partial}{\partial\beta}. \quad (2.16)$$

Normalmente consideraremos v_t como una constante, al menos por regiones o “cartas” del espacio, y usaremos la notación $v_t(\mathbf{x})$ cuando sea necesario recordar esta dependencia.

2.2.2. Derivas del centro guía

En Ec. 2.15 debemos evaluar las derivadas totales. En un tratamiento sistemático, las derivas de centro guía se pueden obtener a partir de un hamiltoniano [8]. Tras el procedimiento, se obtienen dos contribuciones principales a la velocidad perpendicular de partícula: la deriva eléctrica (o deriva ExB) sin correcciones de radio de Larmor,

$$\mathbf{v}_E = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2}, \quad (2.17)$$

y las derivas por curvatura y por gradiente de la intensidad del campo magnético, que aunamos en la expresión conocida [12, 13]

$$\mathbf{v}_{\nabla B} = \frac{m(2v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2)}{2qB^3}\mathbf{B} \times \nabla B. \quad (2.18)$$

En cuanto a la velocidad paralela, expresémosla de momento como $v_{\parallel} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{b}$. Tenemos, entonces, que la velocidad de los centros guía en la Ec. 2.14 es

$$\mathbf{v}_{cg} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_E + \mathbf{v}_{\nabla B} + v_{\parallel}\mathbf{b}. \quad (2.19)$$

Expresemos \mathbf{v}_{cg} en términos de nuestras coordenadas del espacio de fase. De las definiciones de β y λ sacamos inmediatamente

$$v_{\parallel} = \lambda v = \lambda v_t \beta^{1/2}$$

$$v_t^2 \beta = v^2 = v_\perp^2 + v_\parallel^2 = v_\perp^2 + \lambda^2 v^2 \implies v_\perp^2 = v_t^2 \beta (1 - \lambda^2),$$

de manera que la Ec. 2.19 queda

$$\mathbf{v}_{cg} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} + \frac{mv_t^2 \beta (1 + \lambda^2)}{2qB^3} \mathbf{B} \times \nabla B + v_t \sqrt{\beta} \lambda \mathbf{b}. \quad (2.20)$$

2.2.3. Aceleraciones

En la primera versión del código consideramos que el potencial electrostático ϕ es macroscópico, en el sentido de que sus variaciones espaciales vienen dadas por las longitudes de escala del sistema. De esta manera, estamos eliminando la posibilidad de que haya fluctuaciones a la escala típica de la turbulencia de deriva. En este supuesto, podemos despreciar las variaciones explícitas de ϕ frente a las variaciones debidas a la velocidad de deriva $\partial_t \phi \ll \mathbf{v}_{cg} \cdot \nabla \phi$, lo que simplifica la expresión de la variación de β que obtenemos mediante la constancia de la energía total $\mathcal{E} = (1/2)mv^2 + q\phi$:

$$\frac{1}{2}mv_t^2 \frac{d\beta}{dt} = -q \frac{d\phi}{dt} \approx -q \mathbf{v}_{cg} \cdot \nabla \phi,$$

esto es,

$$\frac{d\beta}{dt} \approx \frac{2q}{mv_t^2} \mathbf{v}_{cg} \cdot \mathbf{E}. \quad (2.21)$$

Mediante un razonamiento análogo obtenemos la derivada de λ . Aquí nos basamos en la conservación del llamado primer invariante adiabático, un momento generalizado que puede traducirse en la conservación del momento magnético considerando el orden más bajo en una expansión por radio de Larmor (véase, p. ej. [3]),

$$\mu = \frac{mv_\perp^2}{2B} = \frac{mv_t^2}{2B} \beta (1 - \lambda^2).$$

Derivando esta expresión resulta

$$\frac{d\mu}{dt} = 0 = \frac{mv_t^2}{2B} \left[(1 - \lambda^2) \frac{d\beta}{dt} - 2\beta\lambda \frac{d\lambda}{dt} \right] - \frac{mv_t^2}{2B^2} \beta (1 - \lambda^2) \frac{dB}{dt}.$$

De aquí podemos despejar $d\lambda/dt$. Las partículas exploran distintos campos magnéticos conforme se desplazan por la configuración magnética, de manera

que sustituimos⁷ $dB/dt = \mathbf{v} \cdot \nabla B$:

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1 - \lambda^2}{2\beta\lambda} \left(\frac{d\beta}{dt} - \beta \mathbf{v}_{cg} \cdot \nabla \ln B \right),$$

donde podemos introducir la Ec. 2.21 para obtener

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1 - \lambda^2}{2\beta\lambda} \mathbf{v}_{cg} \cdot \left(\frac{2q}{mv_t^2} \mathbf{E} - \beta \nabla \ln B \right). \quad (2.22)$$

Al sustituir la Ec. 2.20 en las expresiones Ec. 2.21 y Ec. 2.22 se simplifican algunos términos por perpendicularidad, de manera que

$$\frac{d\beta}{dt} = \left[\frac{\beta(1 + \lambda^2)}{B^3} \mathbf{B} \times \nabla B + \frac{2q}{mv_t} \beta^{1/2} \lambda \mathbf{b} \right] \cdot \mathbf{E} \quad (2.23)$$

y

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda}{dt} = \frac{1 - \lambda^2}{2} \left[\left(\lambda \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} + \frac{2q}{mv_t \beta^{1/2}} \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{E} \right. \\ \left. - +v_t \beta^{1/2} \mathbf{b} \cdot \nabla \ln B \right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Usaremos estas fórmulas en la ecuación de evolución, Ec. 2.15.

2.2.4. Término colisional

La ecuación de Boltzmann que vamos a resolver es, estrictamente, una ecuación de Vlasov para el centro guía a la que añadimos un término colisional que, esperamos, representará en la mejor manera posible las modificaciones de f debidas a las interacciones binarias no consideradas en la ecuación de Vlasov [14]. En ésta, los campos \mathbf{E} y \mathbf{B} son promedios a tiempos suficientemente largos y a volúmenes suficientemente grandes en torno a \mathbf{x} (aunque despreciables en las respectivas escalas de nuestro problema) de la influencia de las partículas en un punto dado⁸. Todo lo no tenido en cuenta en este proceso de promediado se traspassa, de acuerdo con las aproximaciones del problema, al término colisional \mathcal{C}_{ab} —usamos subíndices a y b para referirnos a las especies de partículas que colisionan, sean la misma o no. Cuando \mathcal{C}_{ab}

⁷se supone campo magnético estacionario y por tanto $\partial B/\partial t = 0$

⁸Una discusión rigurosa sobre cómo y en qué condiciones se llega a la ecuación de Vlasov puede encontrarse, p. ej., en la referencia [10].

adopta la forma del operador de colisión de Landau se habla de la ecuación de Vlasov-Landau, pero aquí nos referimos siempre de manera general a una ecuación de Boltzmann porque \mathcal{C}_{ab} no tiene por qué respetar una forma concreta. Otras imposiciones al operador de colisión tienen que ver con la conservación de partículas, momento y energía en los procesos elásticos que no involucran cambio de especie [2].

En este trabajo se adopta el método de la Ref. [15] para \mathcal{C}_{ab} . Allí se trata la función de distribución de manera semejante a como lo haremos en la sección 2.3, de manera que dejamos los detalles para entonces y ahora sólo vamos a dar algunas indicaciones generales sobre el operador de colisión que se va a usar. Insistimos en que el sistema numérico objeto de este trabajo no depende de la elección del operador de colisión, aunque si éste es apropiado se facilitarán los cálculos.

De momento estamos interesados en operadores de colisión que involucran electrones e iones, de manera que, en general, la ecuación de evolución para los electrones presentará el operador de colisión

$$\mathcal{C}_e = \mathcal{C}_{ei} + \mathcal{C}_{ee} = \mathcal{C}(f_e, f_i) + \mathcal{C}(f_e, f_e);$$

y la de los iones

$$\mathcal{C}_i = \mathcal{C}_{ii} + \mathcal{C}_{ie} = \mathcal{C}(f_i, f_i) + \mathcal{C}(f_i, f_e).$$

A su vez, podemos aprovechar la proximidad de las funciones de distribución a las respectivas maxwellianas para descomponerlas como $f_e = f_{Me} + \tilde{f}_e$ y $f_i = f_{Mi} + \tilde{f}_i$ donde la tilde es la perturbación a la maxwelliana. Por ejemplo, sea el operador \mathcal{C}_i . El operador de colisión es bilineal y es aniquilador de f_{Mi} ; es decir, $\mathcal{C}(f_{Mi}, f_{Mi}) = 0$ y podemos usar la descomposición para escribir

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_i = & \mathcal{C}(f_{Mi}, f_{Me}) + \mathcal{C}(\tilde{f}_i, f_{Me}) + \\ & + \mathcal{C}(f_{Mi}, \tilde{f}_e) + \mathcal{C}(\tilde{f}_i, f_{Mi}) + \mathcal{C}(f_{Mi}, \tilde{f}_i) + \mathcal{C}(\tilde{f}_i, \tilde{f}_e) + \mathcal{C}(\tilde{f}_i, \tilde{f}_i). \end{aligned}$$

En este trabajo usaremos un operador de colisión linealizado, significando con esto que los dos últimos términos del sumatorio anterior se desprecian con respecto a los demás. Obsérvese, no obstante, que el operador en sí es *no lineal* en las funciones de distribución: las colisiones se producen entre cada especie en continua evolución. No se trata de truncar f de una especie al orden lineal en su expansión en pequeño radio de Larmor, haciéndola colisionar luego con un fondo maxwelliano, sino que en las colisiones entre dos especies

que evolucionan simultáneamente, se desprecia sólo la interacción entre sus respectivas partes no maxwellianas. En resumen, para cualesquier especies involucradas en el problema:

$$\mathcal{C}_{ab} \approx \mathcal{C}(f_{Ma}, f_{Mb}) + \mathcal{C}(\tilde{f}_a, f_{Mb}) + \mathcal{C}(f_{Ma}, \tilde{f}_b)$$

y, por supuesto,

$$\mathcal{C}_{aa} \approx \mathcal{C}(\tilde{f}_a, f_{Ma}) + \mathcal{C}(f_{Ma}, \tilde{f}_a).$$

2.3. Función de distribución

Una vez descrita la ecuación de evolución (Ec. 2.15) y hechos explícitos sus ingredientes (2.23 y 2.24), vamos a dedicar esta sección a describir la función de distribución.

2.3.1. Criterios generales de elección

Avanzábamos al principio de este capítulo que el método hace evolucionar las componentes de f en alguna base apropiada de un espacio lineal \mathcal{P} , motivo por el cual realmente estamos adoptando un método espectral. La hipótesis de trabajo es que f nunca será “demasiado” diferente de una función maxwelliana f_{Maxw} . Interesa, por tanto, poder expandir la parte de f que representa cualquier desviación con respecto a f_{Maxw} de manera que sea fácil evaluar sus integrales en el espacio de velocidades, pues así obtenemos las magnitudes físicas. Esta manera de proceder es lo que en la literatura se conoce como “expansión en momentos de la función de distribución”. Se ha utilizado con éxito en la teoría del transporte en plasmas [16] y puede encontrarse en muchas referencias generales, como [9], pero haremos aquí una breve introducción para ayudar también a fijar la notación.

Sea una función de distribución maxwelliana (normalizada a la densidad)

$$f_{\text{Maxw}}(v) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}v_{\text{th}}} \right)^3 e^{-\frac{v^2}{v_{\text{th}}^2}}, \quad (2.25)$$

donde v_{th} se interpreta como la *velocidad térmica* correspondiente a la temperatura T ,

$$v_{\text{th}} = \sqrt{\frac{2T}{m}},$$

que denotamos v_{th} para distinguirla de la velocidad v_t usada para definir β en la sección precedente. En adelante describiremos una función de distribución cualquiera mediante una función *formalmente* igual a una maxwelliana, y modulada por otra función \hat{f} de manera que

$$f(\beta, \lambda) = \hat{f}(\beta, \lambda) f_{\text{M}}(\beta)$$

donde, por definición, f_{M} es una maxwelliana en tanto tomemos $v_t = v_{\text{th}}$:

$$f_{\text{M}}(\beta) = K_{\text{M}} e^{-\beta} \quad (2.26)$$

dada la constante

$$K_{\text{M}} = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} v_t} \right)^3.$$

Tenemos entonces que nuestras funciones de distribución son

$$f(\beta, \lambda) = K_{\text{M}} e^{-\beta} \hat{f}(\beta, \lambda), \quad (2.27)$$

donde debemos recordar que v_t y β pueden tomar valores distintos en distintos puntos del espacio. Para lo que sigue, consideraremos que v_t es constante.

Describamos de manera simplificada la descomposición “espectral” que vamos a usar y su justificación. Podemos considerar que \hat{f} admite en todo su dominio de definición una expansión en funciones linealmente independientes J_i a través de algún producto escalar:

$$|\hat{f}\rangle = \sum_i a_i |J_i\rangle = \sum_i \langle J_i | \hat{f} \rangle |J_i\rangle.$$

Los coeficientes $a_i = \langle J_i | \hat{f} \rangle$ son “coordenadas” de \hat{f} en la base formada por los objetos $|J_i\rangle$ de un espacio métrico \mathcal{P} , el cual denotamos así porque usaremos polinomios. Si mantenemos la misma base durante el cálculo, conforme avanza el tiempo las coordenadas a_i irán variando. En principio son infinitas las componentes necesarias para describir en \mathcal{P} una función integrable. La hipótesis es que sólo un pequeño subespacio $\mathcal{P}_S \subset \mathcal{P}$ basta para describir con suficiente precisión las modulaciones esperables de una función maxwelliana conforme evoluciona el plasma, es decir, \hat{f} . En este supuesto, nos basta con calcular cómo evoluciona la proyección de \hat{f} sobre \mathcal{P}_S . Por otro lado, esperamos poder expresar de manera razonablemente sencilla las potencias k -ésimas de la velocidad, v^k , pues así calcularemos cómodamente los momentos de la

función de distribución y las magnitudes físicas que de ellos se derivan. Sea $v^k = \sum_i b_i |J_i\rangle$ y sea que queremos hallar⁹ el momento $m_k = \int v^k f d\mathcal{V}_v$. Si encontramos unos $|J_i\rangle$ ortogonales por un producto escalar en \mathcal{P} que involucre el factor $e^{-\beta}$ (ver la Ec. 2.27), m_k se expresará en una manera formalmente semejante a:

$$m_k = \sum_i a_i \langle J_i | \sum_j b_j |J_j\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j \langle J_i | J_j \rangle = \sum_{i,j} a_i b_j \delta_{ij} = \sum_i a_i b_i, \quad (2.28)$$

donde los sumatorios se extenderán como mucho a la dimensión de \mathcal{P}_S .

A continuación detallamos los aspectos recién descritos.

2.3.2. Funciones base mediante polinomios ortogonales clásicos

A menudo tendremos que promediar diversas funciones $w(\beta, \lambda)$ pesándolas con la función de distribución, lo que equivale a evaluar integrales de volumen en el espacio de velocidades:

$$\int d\mathcal{V}_v w(\beta, \lambda) f(\beta, \lambda) = \int d\beta d\lambda \pi v_t^3 \beta^{\frac{1}{2}} w f = K_M \pi v_t^3 \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda \beta^{\frac{1}{2}} w(\beta, \lambda) \hat{f}(\beta, \lambda) e^{-\beta}.$$

Con respecto a la integración en β , el factor $e^{-\beta}$ y los límites de integración sugieren usar polinomios de Laguerre $L(\beta)$ para expandir esta parte de \hat{f} . El hecho de que no aparezcan explícitamente términos en λ y el intervalo finito $[-1, +1]$, por otro lado, sugiere el uso de polinomios de Legendre $P(\lambda)$ para la parte en λ . Para eso, recordemos las propiedades [17]¹⁰:

$$\int_0^\infty d\beta e^{-\beta} \beta^j L_m^j(\beta) L_n^j(\beta) = \frac{\Gamma(n+j+1)}{n!} \delta_{mn} \quad (2.29)$$

$$\int_{-1}^1 d\lambda P_m(\lambda) P_n(\lambda) = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}, \quad (2.30)$$

⁹Aquí estamos suponiendo que las funciones de \mathcal{P} son reales.

¹⁰Puede consultarse cualquier otra referencia sobre la materia, p. ej. [18, 19] o las referencias [20, 21, 22] en la red.

donde conviene recordar que $\Gamma(n+1) = n!$ si n es un número entero. Aquí expresamos la norma al cuadrado de L_n^j usando Γ porque, como veremos, nuestra familia de polinomios de Laguerre corresponderá normalmente a j semi-entero.

La sugerencia para elegir la base de funciones ortogonales es que la función peso que las ortogonaliza incluya los factores obligados mencionados antes: el jacobiano¹¹ \sqrt{g} , la normalización de la pseudomaxwelliana f_M y su exponencial (Ec. 2.26):

$$K(\beta, \lambda) = K(\beta) = 2\pi\sqrt{g}f_M = 2\pi\sqrt{g}K_M e^{-\beta} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\beta^{1/2}e^{-\beta} \quad (2.31)$$

Comprobemos ahora que podemos definir una expansión apropiada de \hat{f} para su uso en integrales del estilo de la Ec. 2.28:

$$\hat{f}(\beta, \lambda) = \sum_{i,j} C_{ij} J_{ij}(\beta, \lambda), \quad (2.32)$$

dadas las siguientes funciones de \mathcal{P} basadas en polinomios de Laguerre generalizados, $L(\beta)$; y de Legendre, $P(\lambda)$:

$$J_{ij}(\beta, \lambda) = k_{ij}\beta^{j/2}L_i^{j+1/2}(\beta)P_j(\lambda). \quad (2.33)$$

Aquí hemos introducido unas constantes de normalización k_{ij} para que la base de las J_{ij} sea ortonormal. Obsérvese que el orden del polinomio de Legendre (igual al grado del polinomio) está ligado a la familia del polinomio de Laguerre. Esto es necesario precisamente para garantizar la ortogonalidad. Así, con el núcleo Ec. 2.31 tenemos definido un producto escalar que ortogonaliza las J_{ij} :

$$\begin{aligned} \langle J_{ij}|J_{kl} \rangle &= \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda K(\beta) J_{ij}(\beta, \lambda) J_{kl}(\beta, \lambda) = \\ &= \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda \pi^{-1/2} \beta^{1/2} e^{-\beta} k_{ij} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda) k_{kl} \beta^{j/2} L_k^{l+1/2}(\beta) P_l(\lambda) = \\ &= \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \int_0^\infty d\beta \beta^{j+1/2} e^{-\beta} L_i^{j+1/2}(\beta) L_k^{l+1/2}(\beta) \int_{-1}^1 d\lambda P_j(\lambda) P_l(\lambda) = \end{aligned}$$

¹¹El jacobiano aparece en el elemento de volumen en el espacio de velocidades, Ec. 2.13. Si usamos el jacobiano, conviene recordar que en el elemento de volumen ya se ha hecho una integración; de ahí que escribamos $dV_v = 2\pi\sqrt{g}d\beta d\lambda$.

$$\begin{aligned}
& \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \int_0^\infty d\beta \beta^{j+1/2} e^{-\beta} L_i^{j+1/2}(\beta) L_k^{l+1/2}(\beta) \delta_{jl} h_j h_l = \\
& \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \delta_{jl} h_j h_l \int_0^\infty d\beta \beta^{j+1/2} e^{-\beta} L_i^{j+1/2}(\beta) L_k^{j+1/2}(\beta) = \\
& \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \delta_{jl} h_j h_l \delta_{ik} p_i p_k,
\end{aligned} \tag{2.34}$$

valores no nulos sólo cuando $i = k$, $j = l$, es decir, cuando se trata del cuadrado de una función J_{ij} . En tal caso, el producto escalar resulta

$$\langle J_{ij} | J_{ij} \rangle = \pi^{-1/2} k_{ij}^2 p_i^2 h_j^2$$

y los valores p_i^2 y h_j^2 se obtienen¹² respectivamente de las Ecs. 2.29 y 2.30. Eligiendo los factores k_{ij} adecuadamente para que la expresión anterior valga la unidad¹³,

$$k_{ij} = \sqrt{\frac{i!(2j+1)\sqrt{\pi}}{2\Gamma(i+j+3/2)}}, \tag{2.35}$$

obtenemos una base de funciones ortonormales:

$$\langle J_{ij} | J_{kl} \rangle = \delta_{ik} \delta_{jl}. \tag{2.36}$$

Ahora podemos expresar \hat{f} como

$$|\hat{f}\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |J_{ij}\rangle, \tag{2.37}$$

y, en tanto la base formada por los $|J_{ij}\rangle$ permanezca durante el cálculo, la evolución de f vendrá dada por la de los coeficientes de la expansión, C_{ij} .

2.3.3. Momentos de la función de distribución

Ahora que hemos establecido un formalismo, veamos su conveniencia evaluando algunas cantidades físicas. Por ejemplo, la densidad es la integral de

¹²Hay que tener cuidado con el hecho de que un subíndice j en las funciones J_{ij} realmente se corresponde con $j + 1/2$ en la familia de los $L_i^{j+1/2}$.

¹³Sabiendo que $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$ vemos inmediatamente que $k_{00} = 1$. Hacemos esta observación porque será útil más adelante.

la función de distribución a todo el espacio de velocidades. Recordando el elemento de volumen Ec. 2.13, tenemos¹⁴

$$\begin{aligned} n &= \int d\mathcal{V}_v f(v) = \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda \pi v_t^3 \beta^{1/2} K_M e^{-\beta} \hat{f}(\beta, \lambda) = \\ &= \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda K(\beta) \hat{f}(\beta, \lambda) \end{aligned}$$

pero esto, en la notación que hemos adoptado, es el valor $\langle 1 | \hat{f} \rangle$. En general aprovecharemos que, como corresponde a haber elegido una base ortonormal,

$$C_{ij} = \langle J_{ij} | \hat{f} \rangle. \quad (2.38)$$

Así, sea que queremos evaluar el promedio a la función de distribución de cualquier función w :

$$\langle w \rangle = \int d\mathcal{V}_v w(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}).$$

Tal como hemos definido el producto escalar, observamos que cualquier integral de volumen en el espacio de velocidades como la anterior, es una proyección

$$\langle w \rangle = \langle w | \hat{f} \rangle. \quad (2.39)$$

Si podemos expresar w como combinación lineal de los J_{ij} , por la Ec. 2.38 el resultado será una combinación lineal de coeficientes C_{ij} . Normalmente nos van a interesar funciones w que son polinomios en β y λ (pues lo normal será buscar momentos de la función de distribución), de manera que su expresión en función de los J_{ij} es exacta y no requerirá muchos términos salvo que se trate de un momento de orden muy alto (correspondiendo a un polinomio de grado igualmente alto).

Antes de evaluar algunos momentos de los órdenes más bajos usando la expresión Ec. 2.39, recordemos algunas definiciones (véase, p. ej., [2]):

- Densidad: $n = \int d\mathcal{V}_v f$.
- Flujo de partículas: $n\mathbf{u} = \int d\mathcal{V}_v \mathbf{v} f$.
- Tensor de esfuerzos: $\mathbf{P} = \int d\mathcal{V}_v m \mathbf{v} \mathbf{v} f$.

¹⁴Obsérvese que, si no hay dependencia de f con λ (velocidades isotropas), esta integral se identifica inmediatamente con la integral en coordenadas esféricas $\int 4\pi v^2 dv f(v)$.

- Presión: $p = nT = \frac{1}{3}\text{Tr}\{\mathbf{P}\}$.

Aquí hemos usado la notación $\mathbf{v}\mathbf{v}$ para simbolizar la díada u objeto de componentes $(\mathbf{v}\mathbf{v})_{ij} = v_i v_j$, y Tr para la traza de un tensor.

En nuestra notación tenemos, por ejemplo:

$$n = \langle 1 \rangle = \langle 1 | \hat{f} \rangle \quad (2.40)$$

$$nu_{\parallel} = \langle v_{\parallel} \rangle = v_t \langle \beta^{1/2} \lambda | \hat{f} \rangle \quad (2.41)$$

$$nT = \frac{1}{3} m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{3} m v_t^2 \langle \beta | \hat{f} \rangle \quad (2.42)$$

y para evaluar de manera sencilla estos momentos hay que expresar los polinomios en β y λ como combinación lineal de los J_{ij} . Puesto que por la definición Ec. 2.33 resultan

$$J_{00} = k_{00} L_0^{1/2} P_0 = k_{00} \quad (2.43)$$

$$J_{01} = k_{01} \beta^{1/2} L_0^{3/2} P_1 = k_{01} \beta^{1/2} \lambda \quad (2.44)$$

$$J_{10} = k_{10} L_1^{1/2} P_0 = k_{10} \left(\frac{3}{2} - \beta \right) \quad (2.45)$$

$$J_{11} = k_{11} \beta^{1/2} L_1^{1/2} P_1 = k_{11} \left(\frac{5}{2} - \beta \right) \beta^{1/2} \lambda, \quad (2.46)$$

tenemos:

$$1 = \frac{J_{00}}{k_{00}} \quad (2.47)$$

$$\beta^{1/2} \lambda = \frac{J_{01}}{k_{01}} \quad (2.48)$$

$$\beta = \frac{3}{2} - \frac{J_{10}}{k_{10}} \quad (2.49)$$

y, recordando la Ec. 2.38, las cantidades 2.40, 2.41 y 2.42 deben ser

$$n = \frac{C_{00}}{k_{00}} \quad (2.50)$$

$$u_{\parallel} = v_t \frac{C_{01} k_{00}}{C_{00} k_{01}} \quad (2.51)$$

$$T = \frac{m v_t^2}{3} \left(\frac{3}{2} - \frac{k_{00} C_{10}}{k_{10} C_{00}} \right) \quad (2.52)$$

Señalemos por último que para una función de distribución maxwelliana debe darse $F_M = n f_M = f_M \hat{f}$ (véase la ec. 2.25), es decir, $\hat{f} = n = C_{00} k_{00}$, en aparente contradicción con la Ec. 2.50 salvo que se cumpla, como es el caso, que $k_{00} = 1$.

2.3.4. Restricción del problema a un subespacio

Se busca la evolución de la función de distribución f . Esto supone, para cada punto espacial \mathbf{x} , calcular la evolución de las *componentes* de \hat{f} en \mathcal{P} . La hipótesis de trabajo es que la aproximación de \hat{f} en base a los $|J_{ij}\rangle$ de menor grado es buena, de manera que restringimos el problema a un subespacio $\mathcal{P}_S \subset \mathcal{P}$ dado por $i \leq N_L, j \leq N_P$. Como vemos en la Ec. 2.33, N_L y N_P son los grados máximos de los polinomios de Laguerre y Legendre, respectivamente, que admitiremos en el problema. Dadas las dimensiones N_L y N_P tendremos

$$|\hat{f}\rangle \approx \sum_{i=0}^{N_L} \sum_{j=0}^{N_P} C_{ij} |J_{ij}\rangle, \quad (2.53)$$

y la precisión numérica del problema dependerá de la dimensión de \mathcal{P}_S . Llamaremos *modo* a cada sumando en esta expansión y, en adelante, supondremos que los sumatorios se extienden a la dimensión $(N_L + 1) \times (N_P + 1)$ como en la Ec. 2.53.

Un problema inherente a este método es que la expansión de f en el espacio \mathcal{P}_S se apoya en su proximidad a una maxwelliana de velocidad promedio nula, es decir, en la preponderancia del modo $C_{00}|J_{00}\rangle$. En las ecuaciones 2.50–2.52 se ve claramente lo que esto significa: si sólo es no nulo el coeficiente C_{00} , no hay velocidad paralela y la temperatura se corresponde con la definición $T = mv_t^2/2$. Pero es totalmente de esperar que la función de distribución evolucione dando lugar a cambios tanto en v_{\parallel} como en T , de manera que el v_t original ya no es representativo del concepto de “velocidad térmica” y f se va extendiendo en \mathcal{P}_S hasta ser de mayor dimensión. Una opción para evitar el problema consiste en ir variando la base en \mathcal{P}_S de manera que el subespacio subtendido por el nuevo elemento $|J_{00}^*\rangle$ se vaya alineando con f en la medida de lo posible. Este cambio de base no es posible de manera general sin complicar demasiado los cálculos. Por un lado, hacer un cambio de coordenadas que elimine C_{01} significa trasladar la función de distribución de manera que la nueva variable no sea v sino $v - v_{\parallel}$, lo que involucra tanto

a β como a λ . Por otro lado, no es costoso recalculer la velocidad térmica con el objeto de anular C_{10} en la nueva base como se explica a continuación.

Partiendo de un v_t inicial, sea que se han calculado los modos a partir de la velocidad normalizada $\beta = v^2/v_t^2$ y se actualiza la velocidad térmica para la especie de masa m , $v_t^* = \sqrt{2T/m}$. La nueva velocidad v_t^* es más apropiada que v_t para expandir \hat{f} , de manera que conviene redefinir la base espectral usando una nueva coordenada $\beta^* = v^2/(v_t^*)^2$. En la base que utiliza β como coordenada cinética se tiene la expansión 2.53. Ahora buscamos los nuevos coeficientes C_{lm}^* tales que la misma \hat{f} se expresa en función de polinomios $J_{lm}^*(\beta^*)$:

$$|\hat{f}\rangle \approx \sum_{l,m} C_{lm}^* |J_{lm}^*\rangle$$

donde $C_{lm}^* = \langle J_{lm}^* | \hat{f} \rangle$. Expandiendo las funciones J según su definición Ec. 2.33 tenemos

$$C_{lm}^* = \langle k_{lm} \beta^{*m/2} L_l^{m+1/2}(\beta^*) P_m(\lambda) | \sum_{ij} C_{ij} k_{ij} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda) \rangle.$$

Aquí es útil recordar que las familias L y P son por separado de polinomios ortogonales, pero en el caso de los $L_i^{j+1/2}$ el núcleo del producto escalar debe ser proporcional a $\beta^{j+1/2} e^{-\beta}$, y no es en principio válido definir la parte en β del producto escalar mediante la Ec. 2.31. Sin embargo, puesto que β^* es proporcional a β , observamos que esto no es un problema: definamos los productos escalares separando las dependencias en β y λ , donde entendemos que el núcleo del producto escalar en los *bra-ket* de los L es $K(\beta)$ y la unidad en el de los P :

$$\begin{aligned} C_{lm}^* &= \sum_{ij} C_{ij} k_{ij} \langle P_m(\lambda) | P_j(\lambda) \rangle \langle k_{lm} \beta^{*m/2} L_l^{m+1/2}(\beta^*) | \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) \rangle = \\ &= \sum_{ij} \left(\frac{v_t^*}{v_t} \right)^j \delta_{mj} C_{ij} k_{ij} k_{lm} \langle \beta^{*m/2} L_l^{m+1/2}(\beta^*) | \beta^{*j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) \rangle = \\ &= \left(\frac{v_t^*}{v_t} \right)^m \sum_i C_{im} k_{im} k_{lm} \langle \beta^{*m} L_l^{m+1/2}(\beta^*) | L_i^{m+1/2}(\beta) \rangle. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Este producto escalar puede realizarse bien numéricamente porque los polinomios $L_i^{m+1/2}(\beta)$, cuando se expresen en función de β^* , seguirán siendo polinomios de grado i en la variable β^* .

Por último, es obvio que conviene hacer los menos cambios de base. El código debería tener una cierta robustez frente a la disparidad entre v_t y la velocidad térmica que se obtendría de la Ec. 2.52.

2.3.5. Bases mal adaptadas al problema

Vamos a hacer una primera aproximación al problema del valor de v_t . El cambio de base recién comentado podría no ser necesario en tanto se disponga del número suficiente de modos para describir la función de distribución ¡a menos que esto sea imposible! Tal sería el caso si, siendo f maxwelliana (Ec. 2.25, a la que correspondería una velocidad térmica $v_t = v_{th}$), la intentamos describir numéricamente mediante una exponencial Ec. 2.26 donde $v_t \neq v_{th}$. La cuestión puede plantearse de la siguiente manera: si f es estrictamente maxwelliana y se usa la correspondiente v_{th} tanto para β como para la constante K_M , entonces por construcción \hat{f} es una constante en el espacio de velocidades –que tomaremos igual a 1 para simplificar; pero si para la misma f se usa una $v_t \neq v_{th}$, entonces necesariamente \hat{f} , que es una función polinómica, debe aproximar una exponencial y quizás nuestros polinomios no sean suficientes a poco que v_t se separe de v_{th} . Esto es lo que podríamos llamar “mala adaptación de f a la base”. En lo que sigue de esta sección vamos a ver hasta qué punto, al menos en principio, nos podemos alejar de v_{th} manteniendo la base de la expansión espectral.

Sea

$$f = f_M(v, v_{th}) = \left(\frac{1}{v_{th}\sqrt{\pi}} \right)^3 e^{-\frac{v^2}{v_{th}^2}}$$

la función que se va a describir mediante otra $f_M^*(v, v_t)$ donde $v_t \neq v_{th}$. Entonces $f = f_M^* \hat{f}$ con $\hat{f} \neq 1$. Concretamente, y dado que $\beta = v^2/v_t^2$, tendremos

$$\hat{f} = \left(\frac{v_t}{v_{th}} \right)^3 e^{\beta} e^{-\beta \frac{v_t^2}{v_{th}^2}} = \left(\frac{v_t}{v_{th}} \right)^3 e^{\delta\beta},$$

donde definimos la desviación de la velocidad térmica

$$\delta = 1 - \left(\frac{v_t}{v_{th}} \right)^2$$

tal que $v_t = v_{th} \Rightarrow \delta = 0 \Rightarrow \hat{f} = 1$. Por definición, $\delta < 1$. Además, tenemos $v_t > v_{th} \Rightarrow \delta < 0$; y $v_t < v_{th} \Rightarrow \delta > 0$.

La función \hat{f} debe describirse mediante una expansión en la base de trabajo y quizás para algunos δ los coeficientes no converjan a cero conforme se aumenta n , el grado de la expansión. Vamos a estudiar este aspecto proyectando \hat{f} sobre la base que usa v_t en vez de v_{th} . Puesto que la maxwelliana es simétrica respecto a λ , los modos asociados a J_{nj} con $j \neq 0$ son nulos y sólo nos interesan las proyecciones

$$\begin{aligned} \langle e^{\delta\beta} | J_{n0} \rangle &= \int_{-1}^1 d\lambda \int_0^\infty d\beta \frac{\beta^{1/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta} k_{n0} L_n^{1/2}(\beta) e^{\delta\beta} = \\ &= \frac{2k_{i0}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\beta \beta^{1/2} e^{-(1-\delta)\beta} L_n^{1/2}(\beta). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Podemos resolver esta integral usando la fórmula de Rodrigues¹⁵ para los polinomios generalizados de Laguerre:

$$L_n^\alpha(\beta) = \frac{1}{n!} \beta^\alpha e^\beta \frac{d^n}{d\beta^n} (e^{-\beta} \beta^{n+\alpha})$$

e integrando por partes:

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty d\beta \beta^{1/2} e^{-(1-\delta)\beta} L_n^{1/2}(\beta) = \\ &\frac{1}{n!} e^{\delta\beta} \frac{d^{n-1}}{d\beta^{n-1}} (e^{-\beta} \beta^{n+1/2}) \Big|_0^\infty - \frac{1}{n!} \int_0^\infty d\beta \frac{d^{n-1}}{d\beta^{n-1}} (e^{-\beta} \beta^{n+1/2}) \delta e^{\delta\beta}. \end{aligned}$$

El primer sumando es nulo porque por definición $\delta < 1$ y $\beta > 1$. Iterando hasta n veces la integración por partes resulta

$$\int_0^\infty d\beta \beta^{1/2} e^{-(1-\delta)\beta} L_n^{1/2}(\beta) = \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\infty d\beta \delta^n e^{-(1-\delta)\beta} \beta^{n+1/2}.$$

Puesto que $1 - \delta > 0$, podemos volver a integrar por partes definiendo $dv = e^{-(1-\delta)\beta}$ y $u = \beta^{n+1/2}$ para obtener, también iteradamente

$$\int_0^\infty d\beta \beta^{1/2} e^{-(1-\delta)\beta} L_n^{1/2}(\beta) = (-1)^n \frac{\delta^n}{n!} \frac{(n+1/2)!}{(1-\delta)^{n+1/2+1}}.$$

¹⁵En este párrafo usaremos fórmulas que pueden encontrarse en [17].

Sustituyendo este resultado y los coeficientes de normalización k_{n0} (Ec. 2.35) en la Ec. 2.55, tenemos

$$\begin{aligned} \langle e^{\delta\beta} | J_{n0} \rangle &= 2 \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{n! \sqrt{\pi}}{2\Gamma(n+3/2)}} \frac{(n+1/2)!}{n!} \frac{\delta^n}{(1-\delta)^{n+3/2}} = \\ &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(1-\delta)^{3/2}} \sqrt{\frac{\sqrt{\pi}\Gamma(n+3/2)}{\Gamma(n+1)}} \left(\frac{\delta}{1-\delta} \right)^n. \end{aligned}$$

Recordando la propiedad

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(N+3/2)}{\Gamma(N+1)} N^{1-3/2} = 1,$$

tenemos en nuestro caso

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle e^{\delta\beta} | J_{n0} \rangle = \frac{1}{\pi^{1/4} (1-\delta)^{3/2}} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{\delta}{\delta-1} \right)^n N^{1/4}.$$

Esta expresión es convergente si $\delta < 1/2$. En consecuencia, la importancia de los grados sucesivamente mayores en la expansión de \hat{f} es creciente si $\delta > 1/2$, en cuyo caso la función de distribución está “mal adaptada”. Como mínimo, entonces, exigimos que $\delta < 1/2$. La condición no es demasiado restrictiva, pues

$$\delta < 1/2 \Rightarrow v_t > \frac{1}{\sqrt{2}} v_{\text{th}} \quad (2.56)$$

o, en términos de temperatura, el plasma (cuasimaxwelliano) no debe tener una temperatura mayor al doble de la que estamos utilizando en $f_M^*(v, v_t)$. Curiosamente, sin embargo, este resultado indica que podemos tener una temperatura tan grande como queramos con respecto a la “correcta”. Puesto que no se trata de una verdadera demostración de la condición de estabilidad del desarrollo de f frente a los valores $\delta \neq 0$, consideraremos la condición 2.56 como orientativa de que no existe una dificultad intrínseca en usar $v_t \neq v_{\text{th}}$ para plasmas cuasimaxwellianos.

2.3.6. Expansión del término colisional

Como se ha dicho, usaremos el operador linealizado de la Ref. [15]. Éste se expresa mediante momentos tensoriales que generalizan nuestros C_{ij} y en

esta sección veremos la relación entre ambos. Es razonable usar un operador linealizado si, como viene siendo el caso, la función de distribución que evoluciona no es muy distinta de $F_M = n f_M$ (una maxwelliana). Gracias a que el operador de colisión es bilineal, la expansión Ec. 2.37 permite escribirlo así:

$$\mathcal{C}_{ab} = \mathcal{C}(f_a, f_b) \approx \mathcal{C}(F_{Ma}, F_{Mb}) + \sum_{ij} [\mathcal{C}(f_a^{ij}, F_{Mb}) + \mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{ij})], \quad (2.57)$$

donde se ha prescindido ya de la parte no lineal $\sum_{ij} \sum_{kl} \mathcal{C}(f_a^{ij}, f_b^{kl})$, y donde (ver las Ecs. 2.32 o 2.37)

$$f_\alpha^{ij} = f_{M\alpha} \hat{f}^{ij} = f_{M\alpha} C_{ij} J_{ij}.$$

Recordemos aquí que $f_\alpha^{00} = n_\alpha$ y que $f_{M\alpha}$ está normalizada a la densidad n_α .

De la Ref. [15] queremos obtener las proyecciones del operador linealizado Ec. 2.57 sobre la base J_{ij} , pero la notación en la Ref. [15] es algo distinta de la nuestra y debemos interrelacionarlas, cosa que hacemos a continuación.

En [15] se expande la función de distribución de la siguiente manera:

$$f_\alpha(\mathbf{v}) = F_{M\alpha} \sum_{ij} \frac{1}{\sigma_i^j} L_k^{l+1/2}(v^2/v_t^2) \mathbf{P}^j(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji} \quad (2.58)$$

donde $\mathbf{P}^j(\mathbf{v})$ pertenece a la familia de *polinomios armónicos irreducibles* dependientes de las tres componentes del vector velocidad \mathbf{v} [8]. Los coeficientes de normalización de las funciones base son los σ_i^j ; los \mathbf{m}^{ji} son momentos normalizados de la función de distribución cuya contracción con los \mathbf{P}^j da lugar a unos coeficientes análogos a nuestros C_{ij} . En primer lugar, nuestro espacio de velocidades no tiene dependencia con el ángulo de giro de Larmor, θ , porque estamos en la aproximación de centro guía (véanse la introducción y los comentarios antes de la Ec. 2.13). Vamos a eliminar esta dependencia en la Ec. 2.58 aprovechando la propiedad siguiente de los $\mathbf{P}^j(\mathbf{v})$. Si θ es un ángulo acimutal en torno a un eje dado por el cursor cualquiera $\hat{\mathbf{b}}$, entonces

$$\int_0^{2\pi} d\theta \mathbf{P}^j(\mathbf{v}) = 2\pi \beta^{j/2} P_j(\cos \phi) \mathbf{P}^j(\hat{\mathbf{b}})$$

siendo P_j , como hasta ahora, un polinomio de Legendre. Además, y dado que los \mathbf{P}^j tienen todas sus componentes del mismo grado j , resulta que

$$\mathbf{P}^j(\mathbf{v}/v) = v^{-j} \mathbf{P}^j(\mathbf{v})$$

y el promedio al ángulo acimutal es

$$\int_0^{2\pi} d\theta \mathbf{P}^j(\mathbf{v}/v) = 2\pi P_j(\cos \phi) \mathbf{P}^j(\hat{\mathbf{b}}). \quad (2.59)$$

Los momentos del operador de colisión Ec. 2.57 involucrarán integrales de los potenciales de Rosenbluth que dependen de $|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|$, siendo \mathbf{v}' la velocidad en la función maxwelliana, la cual no depende de λ . Entonces, el promedio acimutal del potencial de Rosenbluth se refiere al ángulo que forma \mathbf{v} en la función cuasi-maxwelliana con el campo magnético, esto es, λ , de manera que en la expresión anterior podemos identificar θ con el ángulo de giro de Larmor y $\hat{\mathbf{b}}$ con el vector de campo magnético normalizado. Para hacer la aproximación de centro guía, eliminamos la dependencia acimutal de la Ec. 2.58:

$$f_\alpha(v^2/v_t^2, \lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta f_\alpha(v^2/v_t^2, \lambda, \theta)$$

y puesto que la única dependencia acimutal se encuentra en los propios $\mathbf{P}^j(\mathbf{v})$, tenemos

$$\begin{aligned} f_\alpha(\beta, \lambda) &= F_{M\alpha} \sum_{i,j} \frac{1}{\sigma_i^j} L_k^{l+1/2}(\beta) \left[\frac{1}{2\pi} \int d\theta \mathbf{P}^j(\mathbf{v}) \right] \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji} \\ &= n_\alpha f_{M\alpha} \sum_{i,j} \frac{1}{\sigma_i^j} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda) \mathbf{P}^j(\hat{\mathbf{b}}) \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Recordando ahora nuestra expansión de f_α (Ecs. 2.27 y 2.32),

$$f_\alpha(\beta, \lambda) = f_{M\alpha} \sum_{i,j} C_{ij} k_{ij} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda),$$

y por comparación con la Ec. 2.60 obtenemos la relación de nuestros coeficientes Ec. 2.38 –para la especie α – con los de la referencia [15]:

$$C_{\alpha,ij} = \frac{n_\alpha}{k_{ij} \sigma_i^j} \mathbf{P}^j(\hat{\mathbf{b}}) \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji}. \quad (2.61)$$

Según la Ref. [15], las distintas partes del sumatorio en la Ec. 2.57 pueden expresarse como

$$\mathcal{C}(f_a^{ij}(\beta, \lambda, \theta), F_{Mb}) = F_{Ma} \frac{1}{\sigma_i^j} \mathbf{P}^j(\mathbf{v}/v) \cdot \mathbf{m}_a^{ji} \nu_{ab}^{(ji,0)}$$

$$\mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{ij}(\beta, \lambda, \theta)) = F_{Ma} \frac{1}{\sigma_i^j} \mathbf{P}^j(\mathbf{v}/v) \cdot \mathbf{m}_b^{ji} \nu_{ab}^{(0,ji)}$$

donde las funciones $\nu_{ab}^{(ji,0)}$ y $\nu_{ab}^{(0,ji)}$ dependen –aparte de los índices– de: los coeficientes de los $L_i^{j+1/2}$; los coeficientes adimensionales m_b/m_a , T_b/T_a y v_{tb}/v_{ta} ; y la frecuencia de colisión ν_{ab} . Promediamos también estas expresiones mediante la Ec. 2.59 para eliminar la dependencia acimutal:

$$\mathcal{C}(f_a^{ij}(\beta, \lambda), F_{Mb}) = F_{Ma} \frac{1}{\sigma_i^j} P_j(\lambda) \mathbf{P}^j(\mathbf{b}) \cdot \mathbf{m}_a^{ji} \nu_{ab}^{(ji,0)}$$

$$\mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{ij}(\beta, \lambda)) = F_{Ma} \frac{1}{\sigma_i^j} P_j(\lambda) \mathbf{P}^j(\mathbf{b}) \cdot \mathbf{m}_b^{ji} \nu_{ab}^{(0,ji)}$$

La Ec. 2.61 nos permite por fin obtener la expansión del término colisional conocidas las de f_a y f_b mediante los respectivos $C_{a,ij}$ y $C_{b,ij}$:

$$\mathcal{C}(f_a^{ij}, F_{Mb}) = f_{Ma} C_{a,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(ji,0)} \quad (2.62)$$

$$\mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{ij}) = \left(\frac{n_a}{n_b} \right) f_{Ma} C_{b,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(0,ji)}. \quad (2.63)$$

2.4. Adaptación al esquema numérico

El problema que se quiere resolver es tridimensional en el espacio de posiciones y bidimensional en el de velocidades. Como hemos visto en la sección anterior, vamos a trabajar en un espacio de velocidades discreto de muchas más dimensiones a cambio de facilitar la integración numérica. Esta es la esencia de los métodos de elementos *espectrales*, en los que la representación numérica de las funciones se hace mediante uno o unos pocos dominios de dimensión alta. En nuestro caso se trata de dos dominios considerando como tales los espacios respectivos en β y λ , mientras que la dimensión es el número de elementos de las bases respectivas. En cuanto a la parte espacial seguiremos un método más cercano a los llamados *de elementos o volúmenes finitos*, en los que se interpola utilizando polinomios de bajo orden pero en multitud de dominios o celdas espaciales.

En esta sección vamos a introducir algunos elementos necesarios para el esquema numérico con el que resolveremos la ecuación cinética 2.15. Como veremos, un aspecto importante es separar las partes espacial y cinética de la

ecuación para acomodarla al esquema numérico elegido, que se basa en distribuir f y los flujos de manera apropiada en el espacio. Esto permite obtener las divergencias de los flujos como sumas ponderadas de los propios flujos. Por eso, empezaremos por presentar someramente el esquema de integración numérica. En el resto de la sección indicamos cómo:

1. Distribuir espacialmente las magnitudes y sus derivadas espaciales.
2. Separar los términos de la ecuación de evolución que involucran derivadas espaciales, o términos de “flujo”.
3. Obtener las ecuaciones de evolución en el espacio espectral.

Resultarán de utilidad algunas referencias sobre métodos numéricos que incluyan interpolación, polinomios ortogonales y cuadraturas, como [23] o la referencia más aplicada [24].

2.4.1. Discretización espacial y distribución de magnitudes

La Ec. 2.15 presenta una estructura semejante a la de Navier-Stokes (ésta se obtiene de la ecuación cinética tomando los momentos apropiados), donde la incógnita evoluciona en función de la divergencia de unos “flujos” no lineales. Por este motivo hemos preferido usar la forma conservativa Ec. 2.15. Existen en la literatura muchos métodos numéricos apropiados para resolver ecuaciones de este estilo [25] dependiendo de las exigencias de cada problema. Normalmente se busca un compromiso entre varios requisitos importantes, como que las leyes de conservación de las que se obtiene la propia ecuación de evolución sean respetadas al máximo por el esquema numérico. Como es lógico, se busca también que el cálculo presente propiedades de estabilidad numérica, baja disipación y precisión suficiente. Aquí se ha elegido un método reciente llamado *método de diferencias espectrales* [26, 27], al que aludiremos por sus siglas en inglés, SDM, y que esbozamos a continuación para justificar luego la manera en que escindimos la ecuación cinética.

El SDM se basa en dividir el espacio en celdas conexas dentro de las cuales se expande la función incógnita $C(\mathbf{x}, t)$ usando polinomios de interpolación. La incógnita evoluciona dependiendo de la variación espacial de los flujos \mathbf{F} . El método es eficiente si se distribuyen apropiadamente en el espacio

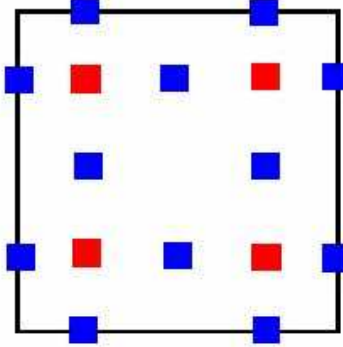


Figura 2.1: Ejemplo en 2D para interpolación con $N_p = 2$: en rojo se muestra la posición de los nodos que definen espacialmente la función f ; en azul, la posición de los nodos que definen el flujo. Se observa que algunos nodos del flujo están en la frontera, lo que permite compartirlos con los de otras celdas.

los nodos de interpolación de C y \mathbf{F} . En la Fig. 2.1 se muestra un ejemplo ilustrativo, en dos dimensiones, de distribución de nodos en una celda. Sea

$$\frac{\partial C(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = S(\mathbf{x}, t) \quad (2.64)$$

y sea que queremos calcular la evolución de C en la celda i -ésima. Sean $\ell_{j,i}(\mathbf{x})$ los polinomios de la base cardinal asociada a los N_p puntos $\mathbf{x}_{j,i}$ donde conocemos $C_{j,i} = C(\mathbf{x}_{j,i})$:

$$C_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_p} \ell_{j,i}(\mathbf{x}) C_{j,i}.$$

En esta expresión tenemos una función $C_i(\mathbf{x})$ definida en toda la celda, si bien realmente sólo calcularemos la evolución de los $C_{j,i}$. Pero obsérvese que, dado un instante temporal, los $C_{j,i}$ son meros coeficientes. Sean ahora los flujos en la misma celda. De ellos queremos obtener derivadas espaciales, motivo por el que usaremos polinomios de un orden (grado) mayor. La localización de sus nodos también va a ser distinta (ver Fig. 2.1), principalmente porque queremos localizar sus derivadas espaciales en los puntos $\mathbf{x}_{j,i}$. Entonces, dada otra base cardinal $m_{k,i}(\mathbf{x})$, tenemos

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{N_p+1} m_{k,i}(\mathbf{x}) \mathbf{F}_{k,i}$$

donde los vectores de flujo $\mathbf{F}_{k,i}$ tienen por componentes los coeficientes de la interpolación polinomial. Algunos de los $\mathbf{F}_{k,i}$ toman el valor del flujo en las fronteras de las celdas, y es gracias a esto que la información se comparte entre celdas: en las fronteras entre dos de ellas, el flujo es bivaluado (un valor por cada celda). Para que el método sea conservativo, el flujo debe ser el mismo en ambas. Se requiere por tanto una función $\mathbf{F}_{\text{total}}(\mathbf{F}_a, \mathbf{F}_b)$ que sustituya a los flujos en las celdas respectivas a y b . Aquí se opta por usar *solvers* de Riemman del tipo Rusanov o Roe, asunto al que nos dedicaremos en el capítulo 3.

Puesto que la dependencia espacial se encuentra en la base cardinal, en cada punto $\mathbf{x}_{j,i}$ obtenemos la divergencia del flujo como

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_i(\mathbf{x}_{j,i}) = \sum_{k=1}^{N_p+1} \nabla m_{k,i}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{F}_{k,i}.$$

Volviendo a la Ec. 2.64, tenemos el siguiente conjunto de ecuaciones de evolución en cada celda i -ésima:

$$\frac{\partial C_{j,i}}{\partial t} + \sum_{k=1}^{N_p+1} \nabla m_{k,i} \cdot \mathbf{F}_{k,i} = S_{j,i}, \quad (2.65)$$

donde $S_{j,i} = S(\mathbf{x}_{j,i})$.

Es importante notar que la evolución de los coeficientes $C_{j,i}$ se obtiene directamente a partir de la Ec. 2.65 sin que haga falta invertir ningún tipo de matriz. Esto es equivalente, en nomenclatura de métodos de elementos finitos, a que la matriz de masas es diagonal, en concreto la identidad. Gracias a esto se pueden usar integradores temporales explícitos (p. ej. Euler directo, Runge Kutta), es decir, no es necesario invertir matrices para calcular la evolución temporal.

2.4.2. Separación de los términos de flujo

La Ec. 2.64 y el subsecuente esquema numérico exigen escindir la ecuación cinética en una suma de términos de “flujo” (los términos \mathbf{F} en 2.65) más otros términos que se considerarán términos fuente. Además, esta separación hay que hacerla en nuestra verdadera ecuación de evolución, que es la ecuación cinética en el espacio transformado; esto es, en la ecuación de evolución del desarrollo espectral de \hat{f} . Entonces conviene distinguir, en el término de

flujo $\nabla \cdot (\mathbf{v}_{cg} f)$ (ver las Ecs. 2.15, 2.19 y 2.20), qué factores involucran sólo dependencias explícitas en \mathbf{x} y cuáles sólo en β y λ . Por un lado,

$$\nabla \cdot (f \mathbf{v}_{cg}) = \nabla \cdot (f_M \hat{f} \mathbf{v}_{cg}) = f_M \nabla \cdot (\hat{f} \mathbf{v}_{cg}) + \hat{f} \mathbf{v}_{cg} \cdot \nabla f_M. \quad (2.66)$$

Para pasar a la notación de \mathcal{P}_S (Ec. 2.53) hay que recordar que la expansión sólo tiene sentido si se va a hacer una proyección sobre los duales, pues entonces intervendrá el núcleo Ec. 2.31 del producto escalar, que es lo que convierte \hat{f} en f . El primer sumando en la expresión Ec. 2.66, quitando f_M , puede expresarse como

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i,j} C_{ij} \mathbf{v}_{cg} |J_{ij}\rangle \right) = \nabla \cdot \left(\sum_{i,j} C_{ij} \mathbf{v}_{cg} \right) |J_{ij}\rangle + \left(\sum_{i,j} C_{ij} \mathbf{v}_{cg} \right) \cdot \nabla |J_{ij}\rangle.$$

Para simplificar los desarrollos expresamos la velocidad del centro guía (Ec. 2.20) como $\mathbf{v}_{cg} = \sum_{k=1}^3 A_k(\mathbf{x}) B_k(\beta, \lambda)$. Recordando la expresión para las derivadas espaciales (Ec. 2.16), tenemos

$$\nabla \cdot \left(\sum_{i,j} C_{ij} \mathbf{v}_{cg} \right) = \sum_{i,j} \sum_k \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot (C_{ij} \mathbf{A}_k) B_k - 2C_{ij} \mathbf{A}_k \cdot \nabla \ln v_t \frac{\partial B_k}{\partial \beta} \beta \right],$$

y

$$\nabla |J_{ij}\rangle = -2 \nabla \ln v_t \beta \frac{\partial}{\partial \beta} |J_{ij}\rangle,$$

de donde se tiene que

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\sum_{i,j} C_{ij} \mathbf{v}_{cg} |J_{ij}\rangle \right) &= \sum_{ij} \sum_{k=1}^3 \left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot (C_{ij} \mathbf{A}_k) B_k - 2C_{ij} \mathbf{A}_k \cdot \nabla \ln v_t \beta \frac{\partial B_k}{\partial \beta} \right) |J_{ij}\rangle \right. \\ &\quad \left. - 2C_{ij} \mathbf{A}_k \cdot \nabla \ln v_t B_k \beta \frac{\partial}{\partial \beta} |J_{ij}\rangle \right]. \end{aligned}$$

Evaluemos ahora el segundo sumando de la Ec. 2.66. Para ello recordemos las dependencias espaciales de la pseudomaxwelliana $f_M = K_M(\mathbf{x}) \exp(-\beta(\mathbf{x}))$, de donde sacamos que $\nabla f_M = -f_M \nabla (3 \ln v_t + \beta)$. Quitando f_M , pues como antes se tendrá en cuenta en el núcleo del operador integral, tenemos la expresión

$$-\hat{f} \mathbf{v}_{cg} \cdot \nabla (3 \ln v_t + \beta) = - \sum_{i,j} \sum_{k=1}^3 C_{ij} B_k \mathbf{A}_k \cdot \nabla (3 \ln v_t + \beta) |J_{ij}\rangle$$

que podemos sumar a la anterior expresión antes de proyectarla sobre cada modo. De esta manera obtenemos la expansión de los términos a que cada $|J_{ij}\rangle$ da lugar tras calcularse la divergencia del flujo correspondiente. Reagrupando términos apropiadamente y proyectando sobre el elemento $\langle J_{lm}|$, vemos que cada $|J_{ij}\rangle$ origina el siguiente término de evolución tras la transformación integral de la Ec. 2.66:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (f \mathbf{v}_d) \longrightarrow \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot (C_{ij} \mathbf{A}_k) \langle J_{lm} | B_k | J_{ij} \rangle + \\ 2 \sum_{k=1}^3 C_{ij} \mathbf{A}_k \cdot \nabla \ln v_t \left[\langle J_{lm} | \beta (1 - \partial_\beta B_k) | J_{ij} \rangle - \langle J_{lm} | B_k \beta \partial_\beta | J_{ij} \rangle - \frac{3}{2} \langle J_{lm} | B_k | J_{ij} \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Resumimos en el cuadro 2.1 algunas de las funciones que aparecen en la Ec. 2.67. La mayoría de éstas se integran con exactitud porque son polinomios en β y λ . Además recordemos que, habida cuenta de que $|J_{ij}\rangle \in \mathcal{P}_S$, entonces también $\partial_\beta |J_{ij}\rangle \in \mathcal{P}_S$ porque la derivación disminuye el orden del polinomio.

Cuadro 2.1: Funciones \mathbf{A}_k y B_k que aparecen en la Ec. 2.67.

k	B_k	$\beta \partial_\beta B_k$	$B_k \beta$	\mathbf{A}_k
1	$\sqrt{\beta} \lambda$	$\frac{1}{2} \sqrt{\beta} \lambda$	$\beta^{3/2} \lambda$	$v_t \hat{\mathbf{b}}$
2	1	0	β	$\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2}$
3	$\beta(1 + \lambda^2)$	$\beta(1 + \lambda^2)$	$\beta^2(1 + \lambda^2)$	$\frac{1}{2} m v_t^2 \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{q B^3}$

En la Ec. 2.67 es fácil observar que sólo sobrevive el primer sumatorio si no hay dependencia espacial de v_t . Además, si v_t se distribuye en las superficies de flujo los términos con $k = 1$ (ver cuadro 2.1) desaparecen por perpendicularidad. Lo mismo se aplica a $k = 2$ si el potencial electrostático es función de la superficie de flujo.

2.4.3. Evolución del desarrollo espectral

La evolución de las componentes C_{ij} (Ec. 2.38) tiene que deducirse de la Ec. de Boltzmann (Ec. 2.15), en la que aparecen funciones relacionadas con las derivas del centro guía y con las aceleraciones que éste experimenta. Como se hace cuando se pasa a cualquier espacio transformado para resolver

un problema, vamos a ver cómo se transforma la ecuación de evolución al pasarla al espacio espectral. Recordemos que esto sólo afecta a las dimensiones asociadas al momento de las partículas (a las velocidades, en nuestro caso), lo que nos ha permitido sacar las dependencias espaciales en los *bra-ket* de la Ec. 2.67. Ésta es ya una parte de la evolución. Veamos las otras dos, que son la derivada temporal y el término fuente.

La derivada temporal en la Ec. 2.15 se obtiene directamente, pues los modos no dependen explícitamente del tiempo:

$$\partial_t f \rightarrow \partial_t \langle J_{lm} | \sum_{ij} C_{ij} | J_{ij} \rangle = \partial_t C_{lm}. \quad (2.68)$$

El término de “aceleraciones” pasa en el esquema numérico, como hemos visto arriba, a ser un término fuente. Según la Ec. 2.15 le corresponden dos partes, una involucrando ∂_β y otra ∂_λ . Empecemos con la primera:

$$\frac{1}{\sqrt{\beta}} \partial_\beta \left(\sqrt{\beta} f \frac{d\beta}{dt} \right) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \partial_\beta \left(\sqrt{\beta} K_M e^{-\beta} \hat{f} \frac{d\beta}{dt} \right)$$

donde expandimos \hat{f} como siempre (Ec. 2.53) y expresamos la derivada total en función de β y λ (Ec. 2.23). Entonces la expresión anterior resulta

$$K_M \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} \sum_{ij} C_{ij} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \partial_\beta [e^{-\beta} \beta^{3/2} (1 + \lambda^2) | J_{ij} \rangle] +$$

$$K_M \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} \frac{2q}{mv_t^2} \sum_{ij} C_{ij} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \partial_\beta [e^{-\beta} \beta \lambda | J_{ij} \rangle]$$

de donde, sin más que derivar y proyectar luego sobre el elemento $\langle J_{lm} |$, se tiene a qué da lugar cada modo J_{ij} a través de este término:

$$-\frac{1}{\sqrt{\beta}} \partial_\beta \left(\sqrt{\beta} f \frac{d\beta}{dt} \right) \rightarrow$$

$$-C_{ij} \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} \left[\frac{3}{2} \langle J_{lm} | (1 + \lambda^2) | J_{ij} \rangle + \langle J_{lm} | (1 + \lambda^2) \beta \partial_\beta | J_{ij} \rangle - \langle J_{lm} | (1 + \lambda^2) \beta | J_{ij} \rangle \right]$$

$$-C_{ij} \frac{2q}{mv_t} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} [\langle J_{lm} | \lambda \beta^{-1/2} | J_{ij} \rangle + \langle J_{lm} | \lambda \beta^{1/2} \partial_\beta | J_{ij} \rangle - \langle J_{lm} | \lambda \beta^{1/2} | J_{ij} \rangle]. \quad (2.69)$$

Pasemos ahora al término de derivación en λ . Procediendo similarmente, usamos la Ec. 2.24 para expresar $d\lambda/dt$ en función de β y λ y derivamos $f d\lambda/dt$. Así, obtenemos la transformación del término

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial \lambda} \left(f(\mathbf{r}, \beta, \lambda) \frac{d\lambda}{dt} \right) \rightarrow \\
& -C_{ij} \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{2B^3} \cdot \mathbf{E} \left[\langle J_{lm} | (1 - 3\lambda^2) | J_{ij} \rangle + \langle J_{lm} | \lambda(1 - \lambda^2) \partial_\lambda | J_{ij} \rangle \right] \\
& + C_{ij} \frac{2q}{mv_t} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} \left[\langle J_{lm} | \lambda \beta^{-1/2} | J_{ij} \rangle - \frac{1}{2} \langle J_{lm} | (1 - \lambda^2) \beta^{-1/2} \partial_\lambda | J_{ij} \rangle \right] \\
& + C_{ij} v_t \mathbf{b} \cdot \nabla \ln B \left[-\langle J_{lm} | \lambda \beta^{1/2} | J_{ij} \rangle + \frac{1}{2} \langle J_{lm} | (1 - \lambda^2) \beta^{1/2} \partial_\lambda | J_{ij} \rangle \right]. \quad (2.70)
\end{aligned}$$

La ecuación de Vlasov en nuestro esquema numérico se obtiene al juntar la Ec. 2.68 y los sumatorios en los índices (i, j) de la Ec. 2.67 para el término de flujo con las Ecs. 2.69 y 2.70 para las aceleraciones. Obsérvese que se cancela la contribución de $\langle J_{lm} | \lambda \beta^{-1/2} | J_{ij} \rangle$ al añadir la Ec. 2.69 a la Ec. 2.70. Sólo falta añadir la parte colisional, que también se considera término fuente.

2.4.4. Proyección del término colisional

Proyectemos el término colisional sobre la base formada por los $|J_{ij}\rangle$. Puesto que las componentes del operador de colisión (Ecs. 2.62 y 2.63) también incluyen funciones maxwellianas, es posible integrar usando el *kernel* que ortogonaliza los $|J_{ij}\rangle$. Para hacer más fácil la comparación con los resultados de la Ref. [15] vamos a expresar la proyección de las componentes de \mathcal{C}_{ab} explícitamente. En el desarrollo espectral necesitaremos los términos

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(f_a^{im}, F_{Mb}) \quad (2.71)$$

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{im}) \quad (2.72)$$

el primero de los cuales es, usando las Ecs. 2.12 y 2.33 para el elemento de volumen y para J_{im} respectivamente; y la Ec. 2.62:

$$\int d\beta d\lambda \pi v_{ta}^3 \beta^{1/2} k_{lm} \beta^{m/2} L_l^{m+1/2}(\beta) P_m(\lambda) f_{Ma} C_{a,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(j,i,0)} =$$

$$\int d\beta d\lambda \pi v_{ta}^3 \beta^{1/2} \beta^{m/2} L_l^{m+1/2}(\beta) f_{Ma} \nu_{ab}^{(mi,0)} P_m(\lambda) P_j(\lambda) k_{lm} k_{im} C_{a,im}.$$

Expresamos la proyección así porque en la Ref. [15] se dan fórmulas numéricas explícitas para los coeficientes:

$$A_{ab}^{mli} = n_a \int d\beta d\lambda \pi v_{ta}^3 \beta^{1/2} \beta^{m/2} L_l^{m+1/2}(\beta) f_{Ma} \nu_{ab}^{(mi,0)} \quad (2.73)$$

$$B_{ab}^{mli} = n_a \int d\beta d\lambda \pi v_{ta}^3 \beta^{1/2} \beta^{m/2} L_l^{m+1/2}(\beta) f_{Ma} \nu_{ab}^{(0,mi)}, \quad (2.74)$$

de manera que podemos escribir la proyección Ec. 2.71 así:

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(f_a^{im}, F_{Mb}) = \frac{1}{2m+1} A_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{a,im}}{n_a}. \quad (2.75)$$

Procediendo igualmente pero usando B_{ab}^{mli} en la Ec. 2.72, tenemos

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{im}) = \frac{1}{2m+1} B_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{b,im}}{n_b}. \quad (2.76)$$

Usando el kernel Ec. 2.31 podemos expresar estos resultados de la siguiente manera:

$$\langle J_{lm} | C_{a,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(ji,0)} \rangle = \frac{1}{2m+1} A_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{a,im}}{n_a} \quad (2.77)$$

$$\langle J_{lm} | C_{b,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(0,ji)} \rangle = \frac{1}{2m+1} B_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{b,im}}{n_b}. \quad (2.78)$$

2.4.5. Evaluación de integrales por cuadraturas

Por lo visto hasta ahora, el esquema numérico requiere hacer numerosas integraciones de términos como

- Coeficientes del desarrollo espectral: $C_{ij} = \langle J_{ij}(\beta, \lambda) | \hat{f}(\beta, \lambda) \rangle$ (Ec. 2.38)
- Funciones dinámicas macroscópicas: $\langle g(\beta, \lambda) \rangle = \langle g(\beta, \lambda) | \hat{f}(\beta, \lambda) \rangle$ (Ec. 2.39)
- Proyecciones: $\langle J_{ij}(\beta, \lambda) | g(\beta, \lambda) | J_{kl}(\beta, \lambda) \rangle$

En general, la descomposición espectral de \hat{f} implica que las integrales en última instancia son del tipo $\langle J_{ij} | g \rangle$, donde g podría ser a su vez una combinación lineal de las propias J_{ij} . En muchos casos $g(\beta, \lambda)$ será el producto

de polinomios en estas variables $g = g_\beta(\beta)g_\lambda(\lambda)$. Si se usan cuadraturas, las integraciones en el espacio de velocidades (β, λ) de polinomios de grados respectivos inferiores o iguales a $2N_L + 1$ y $2N_P + 1$ (ver las Ecs. 2.3.4 y 2.53) serán exactas. Esto significa que las integrales del tipo $\langle J_{ij}|g \rangle$ se pueden evaluar de forma exacta mientras el grado de g no supere N_L para la parte dependiente de β ni N_P para la de λ . Habida cuenta de esto y recordando el núcleo del producto escalar (Ec. 2.31), tendremos integrales

$$\begin{aligned} \langle J_{ij}(\beta, \lambda)|g(\beta, \lambda) \rangle &= \int_0^\infty \int_{-1}^1 d\beta d\lambda e^{-\beta} \beta^{1/2} \frac{k_{ij}}{\sqrt{\pi}} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda) g(\beta, \lambda) \\ &= \frac{k_{ij}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\beta e^{-\beta} \beta^{j+1/2} L_i^{j+1/2}(\beta) \beta^{-j/2} \int_{-1}^1 d\lambda P_j(\lambda) g(\beta, \lambda). \end{aligned} \quad (2.79)$$

Aquí podemos hacer la integración numérica por cuadraturas. Sean α_l^P las raíces o ceros del polinomio $P_{N_P+1}(\lambda)$ y sean w_l^P los pesos correspondientes a la cuadratura de Gauss:

$$w_l^P = \frac{\|P_{N_P}(\lambda)\|^2}{P_{N_P}(\alpha_l^P) [\partial_\lambda P_{N_P+1}](\alpha_l^P)} \quad (2.80)$$

donde $\|\cdots\|$ es la norma (Ec. 2.30); y, análogamente, sean α_k^L las raíces de $L_{N_L+1}(\beta)$ y w_k^L los pesos de la cuadratura de Gauss-Laguerre (ver en la Ec. 2.29 la expresión de la norma):

$$w_k^L = \frac{\|L_{N_L}(\beta)\|^2}{L_{N_L}^{j+1/2}(\alpha_k^L) [\partial_\beta L_{N_L+1}^{j+1/2}](\alpha_k^L)}. \quad (2.81)$$

Con esto podemos resolver la integral 2.79 mediante los sumatorios

$$\langle g(\beta, \lambda)|J_{ij}(\beta, \lambda) \rangle = \frac{k_{ij}}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{N_L} \sum_{l=0}^{N_P} w_k^L w_l^P \frac{L_i^{j+1/2}(\alpha_k^L)}{(\alpha_k^L)^{j/2}} P_j(\alpha_l^P) g(\alpha_k^L, \alpha_l^P). \quad (2.82)$$

Por ejemplo, en cada punto \mathbf{x} de la malla espacial calcularemos los coeficientes del desarrollo

$$C_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{k_{ij}}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{N_L} \sum_{l=0}^{N_P} w_k^L w_l^P \frac{L_i^{j+1/2}(\alpha_k^L)}{(\alpha_k^L)^{j/2}} P_j(\alpha_l^P) \hat{f}(\mathbf{x}, \alpha_k^L, \alpha_l^P). \quad (2.83)$$

Referencias

- [1] V. I. van Rij, S. P. Hirschmann, *Variational bounds for transport coefficients in three-dimensional toroidal plasmas*, Phys. Fluids B **1**, 563 (1988).
- [2] F. L. Hinton, R. D. Hazeltine, *Theory of plasma transport in toroidal confinement systems*, Rev. Mod. Physics **48**(2), 239 (1976).
- [3] A. H. Boozer, *Physics of magnetically confined plasmas*, Rev. Mod. Phys. **76** (4), 1071–1141 (2004).
- [4] L. Villard *et al.*, *Full radius linear and nonlinear gyrokinetic simulations for tokamaks and stellarators: zonal flows, applied ExB flows, trapped electrons and finite beta*, Nucl. Fusion **44** 172 (2004)
- [5] J. A. Heikkinen, S. J. Janhunen, T. P. Kiviniemi, F. Ogando, *Full f gyrokinetic method for particle simulation of tokamak transport*, J. Comp. Phys. **227**(11) 5582 (2008).
- [6] A. J. Brizard, T. S. Hahm, *Foundations of nonlinear gyrokinetic theory*, Rev. Mod. Phys. **79**, 421 (2007).
- [7] M. Rosenbluth, A. N. Kaufman, *Plasma diffusion in a magnetic field*, Phys. Rev. **1**, 1 (1958).
- [8] R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 1. Classical transport theory*, North Holland (1988).
- [9] R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 2. Neoclassical transport theory*, North Holland (1988).
- [10] R. Balescu, *Statistical Dynamics: Matter Out of Equilibrium*, Imperial College Press , pp. 350 (1997).

-
- [11] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Physical Kinetics*, Pergamon, New York (1976).
- [12] K. Nishikawa, M. Wakatani, *Plasma Physics: basic theory with fusion applications*, Springer series on atoms and plasmas, Springer-Verlag, Berlin Heilderberg, pp. 312 (1990).
- [13] F. Chen, *Introduction to plasma physics and controlled fusion*, Plenum Press, New York.
- [14] S. I. Braginskii in: M.A. Leontovich (Ed.), *Transport Processes in a Plasma*, Reviews of Plasma Physics, Consultants Bureau, New York, pp. 205 (1965).
- [15] J. Y. Ji, E. D. Held, *Exact linearized Coulomb collision operator in the moment expansion*, Phys. Plasmas **13**, 102103 (2006).
- [16] S. P: Hirschmann, D. J. Sigmar, *Approximate Fokker–Planck collision operator for transport theory applications*, Phys. Fluids **19**, 1532 (1978).
- [17] M. Abramowitz, I. A. Stegun (Eds.), *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, National Bureau of Standards, Applied Mathematics Series - 55, June 1964, Tenth Printing, December (1972).
- [18] G. Szegő, *Orthogonal polynomials*, ISBN 0821810235, American Mathematical Society (1975).
- [19] D. Jackson, *Fourier Series and Orthogonal Polynomials*, Courier Dover Publications (Mathematics), ISBN 0486438082, pp. 234, (2004).
- [20] http://en.wikipedia.org/wiki/Orthogonal_polynomials
- [21] W. E. Weisstein, *Laguerre Polynomial*. From *MathWorld*—A Wolfram Web Resource (1999), <http://mathworld.wolfram.com/LaguerrePolynomial.html>.
- [22] W. E. Weisstein, *Legendre Polynomial*. From *MathWorld*—A Wolfram Web Resource (1999), <http://mathworld.wolfram.com/LegendrePolynomial.html>.

-
- [23] K. E. Aitken, W. Han, *Theoretical Numerical Analysis: A Functional Analysis Framework*, ISBN 0387951423, Springer, pp. 450 (2001).
- [24] A. Ralston, P. Rabinowitz, *A first course in numerical analysis*, ISBN 048641454X, Courier Dover Publications (Mathematics), pp. 556 (2001).
- [25] J. A. Ekaterinaris, *High-order accurate, low numerical diffusion methods for aerodynamics*, Progress in Aerospace Sciences **41**, 192 (2005).
- [26] Y. Liu, M. Vinokur, Z. J. Wang, *Discontinuous spectral difference method for conservation laws on unstructured grids*, Proc. 3rd International Conference on Computational Fluid Dynamics, Springer, Toronto, Canada. July 12-16 (2004).
- [27] Y. Liu, M. Vinokur, Z. J. Wang, *Spectral difference method for unstructured grids I: Basic formulation*, J. Comp. Phys. **216**, 780 (2006).

Capítulo 3

Métodos numéricos

En este capítulo se va a profundizar en los aspectos numéricos. En la sección 3.2 se avanzará en el conocimiento de SDM (el método utilizado para resolver la convección). Las condiciones de contorno se comentan en la sección 3.3. En el apartado 3.4.1 se describe el modo en que se lleva a cabo el proceso de integración temporal señalando después (3.4.2) la manera en que se obtienen los estados estacionarios. Como se verá, un punto importante en la precisión de la convección es un correcto mallado, y para ello se ha desarrollado una herramienta de software que completa el presente código y genera mallas adecuadas para las simulaciones, como explicaremos en la sección 3.5. Por último, algunos detalles de la paralelización se dan en la sección 3.6.

3.1. Introducción a las técnicas numéricas

En problemas de fluidos convencionales es común resolver las ecuaciones de la densidad n , la velocidad \mathbf{u} (que involucra un momento para cada componente, p. ej. $u_i = \int f v_i d\mathbf{v}$) y la temperatura T , que son los cinco momentos básicos de la función de distribución f . Esto es posible porque dichos fluidos suelen ser altamente colisionales y su función de distribución es en esencia una maxwelliana, la cual queda localmente definida mediante n , \mathbf{u} y T . Sin embargo, recordemos que la dinámica de un momento de la función de distribución depende de los momentos de orden superior, por lo que es imposible un cálculo exacto sin conocer los infinitos momentos que la definen. Si el fluido es muy colisional, se puede “cerrar” el sistema de ecuaciones: se hace una

estimación de los momentos de orden superior que aparecen en las ecuaciones de los momentos de orden inferior (normalmente densidad, velocidad y temperatura). Así el problema se reduce a resolver varias ecuaciones acopladas de convección en el espacio, es decir, ecuaciones del tipo $\partial_t C + \nabla \cdot \mathbf{F} = S$ (ver Ec. 2.64) donde C es la magnitud en convección que en nuestro caso serán los coeficientes del desarrollo espectral de la función de distribución; \mathbf{F} son los flujos y S involucra los términos de “convección en el espacio de velocidades”. Dichas ecuaciones pueden resolverse mediante métodos convencionales tales como elementos, diferencias o volúmenes finitos; o bien códigos espectrales.

En los fluidos en los que es necesaria una mayor precisión, pues la distancia media entre colisiones no es tan pequeña en comparación con el sistema a estudiar (es decir, las colisiones no son tan frecuentes como para que sea suficiente la descripción mediante densidad, velocidad y temperatura), se pueden aplicar aproximaciones de mayor orden. Un método muy potente es el de los 13 momentos de Grad [1], que añade ecuaciones para la evolución de las tres componentes del flujo de calor y las cinco componentes del tensor de presiones, esto es, otros ocho momentos de f . Entonces se hacen evolucionar 13 momentos en lugar de 5, por lo que el cálculo permite alejarse más de la distribución maxwelliana.

En el caso de fluidos como los plasmas de fusión, donde la colisionalidad es tan baja que la distancia media entre colisiones puede ser mayor que las dimensiones de la máquina que contiene al plasma, se hace necesario estudiar más momentos. Así, Balescu habla de expansiones de hasta 29 momentos [2].

Ya se ha comentado que, al expresar la FdD en el espacio de velocidades, se ha optado por expandir su dependencia con las componentes de la velocidad en series de polinomios de Legendre-Laguerre. La razón es que la expresión de los momentos clásicos de la función de distribución, como la densidad, la temperatura y la velocidad, son combinaciones lineales de pocos términos de la serie. Por lo tanto, no se hacen evolucionar momentos de la velocidad en el sentido habitual sino combinaciones lineales de ellos a los que hemos llamado “modos” en el capítulo anterior por analogía con los desarrollos espectrales. Podemos hablar sin embargo de equivalencia entre modos y momentos, pues la hay en lo que respecta a grado del polinomio en las variables del espacio de velocidades. Entonces, el presente método trata de hacer una aproximación con un número de modos indeterminado a priori, dejando que el cierre no sea establecido de forma analítica sino por convergencia espectral. Es decir, si se usan suficientes modos de la función de distribución, es de esperar que el método converja puesto que los modos de orden

alto son cada vez más pequeños y añadir más modos al cálculo no modifica sustancialmente el resultado: si la expansión que se calcula es conservativa numéricamente, también lo serán la temperatura (energía), la densidad y los flujos.

Una limitación de la expansión en modos es el requisito de que la velocidad de normalización esté cerca de la correspondiente a la maxwelliana por la que se aproxima la función de distribución. En caso contrario, el número de modos necesarios para expresarla crece demasiado. Así, si en una coordenada radial hay una temperatura y en otra es diez veces inferior, pero se usa la misma temperatura de normalización, la simulación requerirá un número ingente de modos y será inabordable. Por tanto, es necesario que la temperatura de normalización (que, recordemos, es un parámetro de la base de polinomios en la que se expande f) varíe con la posición. En definitiva, el problema es que la base depende de las coordenadas espaciales a través de la normalización porque los polinomios tienen dicha dependencia a través de β (ver ecuación (2.33)). Como la forma de obtener las ecuaciones de avance es proyectar la ecuación de Boltzmann sobre la base, y ello supone la multiplicación por dichos polinomios, nos encontramos con un doble problema:

– Si la base depende del espacio (es decir, la temperatura de normalización depende del espacio), no será posible expresar, de forma inmediata, las ecuaciones de manera conservativa:

$$\frac{\partial Q(\mathbf{x})}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}) = S(\mathbf{x}),$$

la cual tiene ventajas computacionales, como ya veremos.

La solución a este problema consiste en dejar que la temperatura de normalización sea constante en el interior de cada elemento de la malla, pero que pueda variar de un elemento a otro. Esto requiere tener en cuenta el cambio de base cada vez que se necesite un valor por parte de un elemento vecino cuya normalización es distinta; pero, a cambio, dejan de aparecer términos que no se pueden expresar de forma conservativa.

– Si la base depende del tiempo (es decir, la temperatura de normalización depende del tiempo), un problema lineal en su parte convectiva puede pasar a ser no lineal. Esto mismo ocurre en la obtención de las ecuaciones de Navier-Stokes o del método de Grad a partir de la de Boltzmann para un problema sin fuerzas que dependan de la función de distribución (por ejemplo

un campo magnético o uno eléctrico). En este caso, la parte convectiva de la ecuación de Boltzmann es lineal. La parte convectiva de las ecuaciones de Navier-Stokes o las del método de Grad, sin embargo, no lo son. La linealidad se pierde en el momento en que la base usada para expandir la función de distribución varía con el tiempo, pues en los citados ejemplos ambas bases toman como parámetros las velocidades y temperaturas medias de la función de distribución que, obviamente, cambian con el espacio y el tiempo. Así, al proyectar sobre la base para obtener la dinámica de los modos, aparecen términos no lineales. La solución a este problema es evitar que la base (por tanto la normalización de la temperatura) varíe a medida que el tiempo evoluciona. Esto no impide que, en el caso de requerir un reajuste de las bases a medida que se modifique la temperatura en un punto, se pueda parar la simulación, modificar las bases, estimar los nuevos coeficientes y continuar con la simulación. Obsérvese que en ningún momento se efectúan cambios de base según una dependencia con el *tiempo físico* del problema simulado, sino como una conveniencia en tiempo de computación. Esto mantiene lineal el problema de la convección con las consecuentes ventajas a la hora de resolverlo numéricamente.

Cabe destacar que este método podría aplicarse a fluidos más convencionales. De hecho, se puede establecer cierta similitud con el método de Lattice Boltzmann (LBM)[3]. Se puede demostrar [4] que el LBM equivale a resolver la ecuación de Boltzmann usando polinomios de Laguerre como base para la función de distribución e integrando numéricamente por cuadraturas de Gauss. Las ecuaciones resultantes, en lugar de establecer la dinámica de los momentos de la función de distribución, establecen la dinámica de los nodos de integración de Gauss, que son puntos con una velocidad concreta. Sin entrar en más detalles sobre el LBM, lo importante es notar que el método aquí presentado es equivalente al LBM en el caso de expandir la función de distribución en pocos modos y usar una temperatura de normalización constante en todo el espacio. De hecho, se podría pensar en un método mixto entre el actual y el LBM, ya que uno de los principales inconvenientes del LBM es que la temperatura de la función de distribución no debe alejarse mucho de la de normalización, pues se desestabiliza. Esto se entiende al recordar, como se ha mencionado en el capítulo anterior, que las bases utilizadas no se comportan bien cuando la temperatura de la función de distribución es muy diferente a la de normalización. Una opción intermedia sería, por tanto, el LBM con una temperatura de normalización que pueda ser distinta

en diferentes recintos, si bien al hacer esto se pierde parte de la eficiencia de LBM, una de sus mayores virtudes.

3.2. Método SDM

El SDM, o “método de las diferencias espectrales” [5, 6], es una solución mixta entre los métodos de volúmenes finitos, que tienen la bondad de ser localmente conservativos, y los de diferencias finitas, más sencillos de implementar y más escalables a la hora de usar polinomios de orden alto para expresar la función a resolver. Un esquema del método se dio en la sección 2.4.

La propiedad de que el método sea conservativo localmente para las variables en convección quiere decir que si se lleva a cabo una integración de dichas variables, el resultado, a medida que avanza el tiempo, es constante en la precisión de la máquina. Con ello, por ejemplo, se evita una variación artificial de la energía o del número de partículas por efectos numéricos. Como avanzábamos en 1.3, para conseguir dicha conservación local es a menudo necesario que la función aproximada sea discontinua entre los elementos¹. En nuestro caso esto no sólo se debe a las diferencias –pequeñas– que se originan a ambos lados de las superficies colindantes entre celdas debido a la discretización inherente al cálculo numérico, sino también debido a la dependencia de f con la velocidad térmica, ver Ec. 2.25.

Otra de las características mencionadas del SDM es el uso de polinomios de orden (grado) arbitrario como bases de aproximación para la solución. Esto permite aumentar la precisión de la simulación sin tener que aumentar el número de elementos de la malla. Es por ello que se puede considerar este método como de “elementos espectrales” puesto que el error decrece de forma exponencial a medida que se incrementa el grado del polinomio de aproximación, es decir, el número de polinomios de las bases (en contraposición al decrecimiento geométrico del error con el aumento del número de elementos de malla).

Para mantener la conservación local de las cantidades en convección, el flujo a ambos lados de las discontinuidades entre elementos de malla debe ser

¹No hay que confundir la función de aproximación con la función real. El que se aproxime con algo discontinuo una función continua no quiere decir nada sobre ésta, es tan solo un método de aproximación numérica.

el mismo. Puesto que el flujo obtenido en cada lado depende de las propiedades locales a cada elemento de malla, no tiene por qué coincidir a ambos lados de la discontinuidad. Esto obliga a tomar una decisión sobre qué flujo se considera. Para garantizar la estabilidad del método, es común tomar el flujo dado por un *solver* de Riemann [7]. En concreto aquí usaremos uno de tipo Roe [8]. En esencia se trata de llevar a cabo la diagonalización por autovalores de la matriz jacobiana del flujo y, en el sistema de referencia de los autovectores, o subespacios propios, seleccionar el flujo en función del signo de la velocidad: si es positiva se toma el de un lado y si es negativa el del otro. Veamos esto con más detalle (figura 3.1).

Sea $\mathbf{Q}(\mathbf{x})$ el vector de cantidades en convección (en lo que sigue eliminamos la dependencia con la posición espacial \mathbf{x} para aligerar la notación y consideraremos vectores “columna”, salvo que se especifique su trasposición):

$$\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2, \dots, Q_n)^T. \quad (3.1)$$

Sea $\mathbf{F}_i(Q)$ el vector flujo asociado a cada una de las cantidades Q_i en convección. Así, se puede escribir

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_i(\mathbf{Q}) = S_i,$$

donde S_i son las fuentes, de las cuales ahora no nos preocuparemos aunque las sintetizaremos también en un vector $\mathbf{S} = (S_1, \dots, S_n)^T$. Las componentes de estos vectores se refieren a las cantidades sobre las que se resuelve el problema de convección, relacionadas con el desarrollo espectral de f (Ec. 2.65).

De una forma más compacta, la anterior ecuación se puede expresar como:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{Q}))^T = \mathbf{S}, \quad (3.2)$$

donde $\mathbf{F}(\mathbf{Q})$ es la matriz de flujo cuyas columnas están formadas por los vectores \mathbf{F}_i :

$$\mathbf{F} = (\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \dots, \mathbf{F}_n). \quad (3.3)$$

El problema de Riemann se resuelve por separado en cada una de las tres dimensiones espaciales. Por eso convendrán las siguientes definiciones: por un lado, tres vectores \mathbf{L} , \mathbf{M} y \mathbf{N} cuyas n componentes son las *filas* de \mathbf{F} ; por ejemplo, para la primera componente espacial x (coordenada cartesiana x) tenemos el vector \mathbf{L} dado por $(F_{1x}, \dots, F_{nx})^T$. Definamos además la matriz

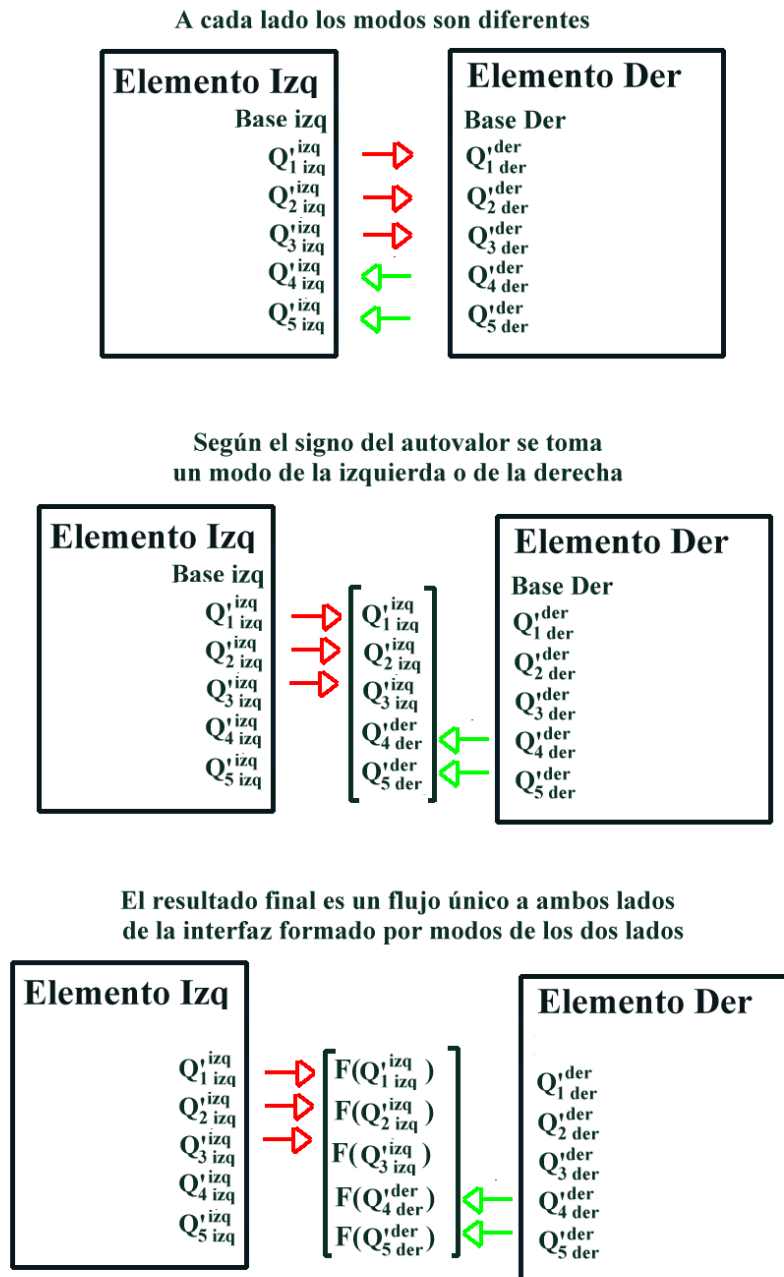


Figura 3.1: Esquema del método de estabilización tomando como ejemplo un flujo lineal.

jacobiana a partir del flujo asociado a cada dimensión espacial, esto es, el juego de matrices jacobianas $n \times n$

$$\mathbf{J}_L = \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}}; \quad \mathbf{J}_M = \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \mathbf{Q}}; \quad \mathbf{J}_N = \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{Q}}. \quad (3.4)$$

Por ejemplo, los elementos de \mathbf{J}_L tomarán el valor

$$J_{L,ij} = \frac{\partial L_i(\mathbf{Q})}{\partial Q_j}$$

y análogamente los demás. Para simplificar, centrémonos en el caso de \mathbf{J}_L . Se puede definir la matriz diagonal de autovalores \mathbf{A}_L que obtenemos de la matriz \mathbf{R}_L de autovectores

$$\mathbf{J}_L = \mathbf{R}_L \mathbf{A}_L \mathbf{R}_L^{-1}.$$

Consideremos el valor absoluto de \mathbf{J}_L como:

$$|\mathbf{J}_L| = \mathbf{R}_L |\mathbf{A}_L| \mathbf{R}_L^{-1},$$

donde $|\mathbf{A}_L|$ simboliza la matriz diagonal \mathbf{A}_L con los autovalores tomados en módulo. Entonces, aplicar un solver de Roe es equivalente a utilizar en ambas superficies colindantes de los elementos de malla el flujo modificado:

$$\mathbf{L} = \frac{1}{2} [\mathbf{L}(\mathbf{Q}_{der}) + \mathbf{L}(\mathbf{Q}_{izq}) - |\mathbf{J}_L| (\mathbf{Q}_{izq} - \mathbf{Q}_{der})] \quad (3.5)$$

donde \mathbf{Q}_{der} y \mathbf{Q}_{izq} son los valores tomados por \mathbf{Q} a cada lado de la interfaz, que no tienen por qué ser iguales en el método SDM como venimos diciendo. Igualmente se procede con las jacobianas \mathbf{J}_M y \mathbf{J}_N asociadas a las otras dimensiones espaciales.

Para comprender el significado de (3.5), supongamos que \mathbf{F} es lineal con respecto a las cantidades en convección Q_i . Entonces, las tres matrices jacobianas aplicadas sobre \mathbf{Q} equivalen a la matriz de flujo, lo que podemos simbolizar así:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}^T \\ \mathbf{M}^T \\ \mathbf{N}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\mathbf{J}_L \mathbf{Q})^T \\ (\mathbf{J}_M \mathbf{Q})^T \\ (\mathbf{J}_N \mathbf{Q})^T \end{bmatrix}.$$

Fijémonos en la dimensión espacial asociada a \mathbf{L} y contemplemos el problema de convección en la base de los subespacios propios de \mathbf{J}_L , esto es, sean

$\mathbf{L}' = \mathbf{R}_L^{-1}\mathbf{L}$ y $\mathbf{Q}' = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$. Entonces tenemos $\mathbf{L}' = \mathbf{A}_L\mathbf{Q}'$. Las componentes de este nuevo objeto son $L'_i = \alpha_i Q'_i$ donde los α_i son autovalores de \mathbf{A}_L . Pues bien, la Ec. 3.5 indica que el criterio para elegir el flujo en la frontera es considerar cada componente $Q_{der,i}$ o bien $Q_{izq,i}$ dependiendo del signo de α_i . Análogo razonamiento haríamos para \mathbf{M} y \mathbf{N} . Todo esto puede interpretarse como que aplicar la Ec. 3.5 a cada dimensión espacial equivale a tomar el flujo correspondiente al elemento de malla *de donde viene la velocidad*. Con ello se garantiza la estabilidad. Esta manera de entender el *solver* de Roe se esquematiza en la figura 3.1. En realidad, en la ecuación de conservación para cada Q_i se encuentran acopladas todas las componentes espaciales, pero el *solver* garantiza la estabilidad numérica gracias a realizar una selección adecuada, Ec. 3.5, del flujo en las interfaces en base a los signos de los autovalores de las jacobianas 3.4.

Como vemos, el cálculo del flujo en las fronteras es costoso, pues requiere la diagonalización de la matriz de flujo en todos los nodos de los contornos de los elementos de malla. No obstante, hay que observar que el problema numérico recién expuesto se aplica a los flujos dados por la Ec. 2.67, donde está claro que dependen linealmente de los coeficientes del desarrollo espectral de f (que desempeñan el papel de los Q_i en este párrafo), al menos en tanto los campos eléctrico y magnético sean estacionarios. Por lo tanto, sólo es necesario rehacer la diagonalización cada vez que se modifique la matriz jacobiana debido a su dependencia con las velocidades de deriva: si los campos electrostáticos y magnéticos están fijados, y la normalización con la velocidad térmica también, se puede tener precalculada. A la dependencia con la normalización nos referiremos un poco más adelante.

El código se ha preparado preveyendo la posible variación temporal de los campos eléctricos y magnéticos. En tal caso es necesario recalcular el flujo en cada iteración temporal, lo que se resuelve mediante la solución de compromiso de aplicar el *solver* de Roe a los flujos por separado. Siguiendo con el ejemplo de la dimensión espacial asociada al vector \mathbf{L} , la matriz jacobiana, en el caso de la ecuación cinética de deriva, se puede expresar en términos generales como:

$$\mathbf{J}_L = \sum_k W_L^k(\mathbf{x}, t) \mathbf{J}_L^k,$$

donde los valores $W_L^k(\mathbf{x}, t)$ son escalares y las \mathbf{J}_L^k son matrices constantes asociadas a cada término \mathbf{A}_k de las derivas (véanse la Ec. 2.67 y la tabla 2.1). El aplicar el *solver* de Roe a cada una de las partes equivale a usar

$\sum_k |W_L^k(\mathbf{x}, t)| |J_L^k|$ en lugar de $|J_L|$ (y análogamente con J_M y J_N). Esto aumenta ligeramente la difusividad numérica, pero en las simulaciones se comprueba que sigue garantizando la estabilidad. La ventaja de hacer esto es que tan solo hay que diagonalizar al principio de la simulación las matrices J_L^i etc, lo que supone un ahorro considerable desde el punto de vista computacional. Si bien es cierto que en el ejemplo visto los flujos son lineales con respecto a \mathbf{Q} , los *solvers* de Roe son utilizados con asiduidad en sistemas no lineales, tales como las ecuaciones de Navier-Stokes en regímenes turbulentos. Un ejemplo se tiene en la referencia [9], donde se utiliza este *solver* para estabilizar el SDM en una simulación LES².

Hay una cuestión adicional a considerar, y es que a cada lado de la discontinuidad puede existir una normalización diferente: hay que transformar los coeficientes de la magnitud en convección a la base en la temperatura de normalización del otro elemento antes de realizar el cálculo o la comparación de flujos a ambos lados de la interfaz. Esto obliga a realizar una ligera modificación del *solver* de Roe. Veámosla esquemáticamente.

Como antes, pensemos en una única componente espacial (la asociada a \mathbf{L}), si bien vamos a prescindir del subíndice L para aligerar la notación. La transformación de los modos de la base en un elemento a la vecina se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{der}^{izq} &= \mathbf{T}_{der}^{izq} \mathbf{Q}_{der}^{der} \\ \mathbf{Q}_{izq}^{der} &= \mathbf{T}_{izq}^{der} \mathbf{Q}_{izq}^{izq}, \end{aligned}$$

donde:

\mathbf{Q}_{der}^{der} es el vector de modos en la superficie del elemento derecho expresado en la base del derecho

\mathbf{Q}_{izq}^{izq} es el vector de modos en la superficie del elemento izquierdo expresado en la base del izquierdo

\mathbf{Q}_{der}^{izq} es el vector de modos en la superficie del elemento derecho expresado en la base del izquierdo

\mathbf{Q}_{izq}^{der} es el vector de modos en la superficie del elemento izquierdo expresado en la base del derecho

\mathbf{T}_{izq}^{der} es la matriz que transforma los modos del lado izquierdo al derecho

²Large Eddy Simulation: simulaciones de fluidos turbulentos en las que las escalas espaciales inferiores al tamaño de malla se resuelven en base a modelos teóricos.

T_{der}^{izq} es la matriz que transforma los modos del lado derecho al izquierdo

Al expresar los modos \mathbf{Q} en la base de autovalores $\mathbf{Q}' = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}$ (no confundir con la transformación por la normalización) tenemos \mathbf{Q}'_{der} y \mathbf{Q}'_{izq} . Los modos asociados a autovalores de un signo (velocidad saliente del elemento) permanecerán fijos, y los del otro signo se fijarán al otro lado de la interfaz. Por tanto habrá una serie de modos fijados en \mathbf{Q}'_{der} y el resto estará fijado en \mathbf{Q}'_{izq} (ver figura 3.2).

Expresando ambos vectores en la misma base, por ejemplo en la de la izquierda, tenemos:

$$\mathbf{Q}'_{der}{}^{izq} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{T}_{der}^{izq}\mathbf{Q}_{der}{}^{der} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{T}_{der}^{izq}\mathbf{R}\mathbf{Q}'_{der}{}^{der} = \mathbf{T}'_{der}{}^{izq}\mathbf{Q}'_{der}{}^{der}$$

siendo

$$\mathbf{T}'_{der}{}^{izq} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{T}_{der}^{izq}\mathbf{R}.$$

Los modos que deban ser transmitidos de izquierda a derecha se fijarán en $\mathbf{Q}'_{der}{}^{izq}$, y el resto (los que deban ser transmitidos de derecha a izquierda) se fijan en $\mathbf{Q}'_{der}{}^{der}$. El resultado es un sistema de ecuaciones en el que parte de las variables están en un lado y parte en el otro, algo que podríamos simbolizar así:

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_a \\ y_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_a \\ x_b \end{bmatrix}.$$

Siendo la diferencia entre ambas bases pequeña, la matriz de transformación es cercana a la diagonal (se supone que la normalización es parecida para elementos vecinos). Se puede por tanto encontrar en general una solución válida para (x_a, x_b) en este problema de bases mixtas. Se ha comprobado que esta última transformación añadida al *solver* de Roe no altera sus propiedades de estabilidad numérica.

Un problema inherente al uso de métodos numéricos tipo elementos finitos, volúmenes finitos o elementos espectrales del que no está exento el SDM, es la aparición de difusividad numérica. La difusividad numérica, como su nombre bien indica, es el equivalente numérico a la difusión física. Esto quiere decir que si tenemos una cantidad que queremos poner en convección mediante una velocidad uniforme en el espacio, al cabo del tiempo, si dicha cantidad estaba espacialmente contenida, terminará difundiéndose por todo el recinto de integración a pesar de que esto no ocurre en la solución física.

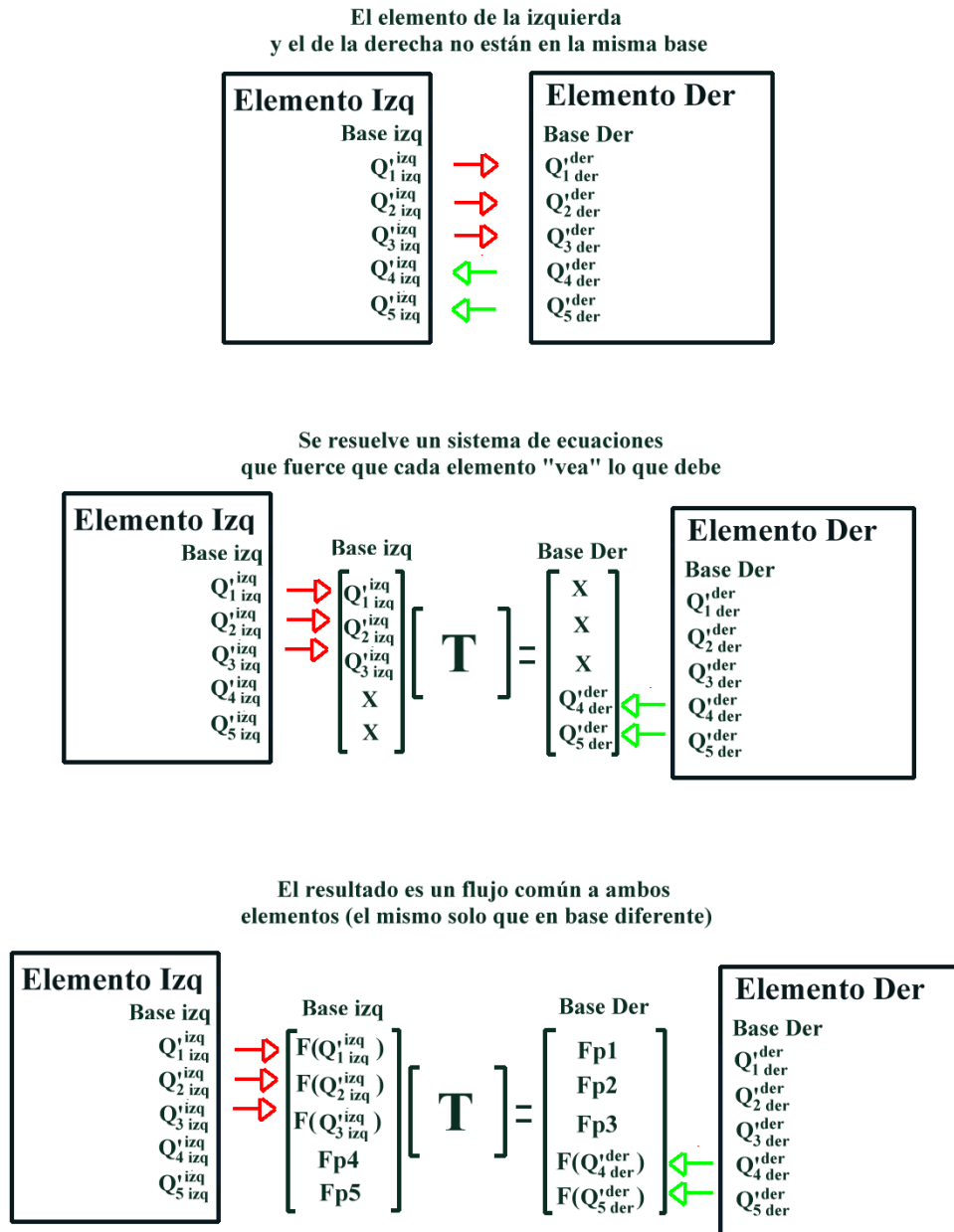


Figura 3.2: Estabilidad con bases diferentes.

La difusividad numérica disminuye a medida que incrementamos el orden de aproximación de la base o el número de elementos que componen la malla. Como ejemplo, en la figura 3.3 se puede apreciar el buen comportamiento del SDM ante la difusividad numérica: para una condición inicial dada, se puede recorrer el recinto diez veces sin que apenas se difunda la cantidad arrastrada convectivamente. En la figura 3.4 se observa la convección frente a una distribución compleja de velocidades. La alta filamentación indica que la difusividad numérica es baja, puesto que una alta difusividad impediría fuertes gradientes espaciales.

Puesto que el efecto de la difusividad numérica depende del problema a resolver, el análisis cuantitativo de cómo afectan tanto el orden de los polinomios espaciales como el número de elementos de malla a la solución física se verá en un capítulo posterior. No obstante, los *solvers* que estamos usando son de uso común en problemas de ondas de choque o cuando existen discontinuidades fuertes –s sofisticaciones del problema de Riemann– y cabe esperar un buen comportamiento en el tipo de problema numérico que se resuelve aquí. Durante la preparación del código se han realizado numerosas pruebas, como las mostradas en las Figs. 3.3 y 3.4, para verificar la bondad de los *solvers* elegidos en lo que a estabilidad y difusividad numérica respecta.

3.3. Condiciones de contorno

No es fácil establecer unas condiciones de contorno óptimas en este problema porque las mallas usadas se cortan no en la cámara de vacío, sino en el borde del plasma en la última superficie cerrada de flujo (LCFS). En un futuro la solución ideal sería extender la malla hasta la pared de la cámara de vacío: esto facilitaría las condiciones de contorno, pero complicaría el cálculo entre la LCFS y dicha pared. Por ahora restringimos el cálculo hasta la LCFS.

En el estado actual del código, el método en la frontera es, en esencia, un problema de convección igual al tratado en el apartado anterior, solo que con las cantidades en un lado fijadas³. Volviendo a la interpretación de la Fig. 3.1 podemos decir que existen dos zonas de frontera, dada una dirección espacial, para cada una de las cantidades en convección: tenemos flujo entrante en el recinto de simulación y flujo saliente. En las zonas en las que el flujo sale (como antes, nos referimos al sistema de referencia de los autovalores) no

³Esto es equivalente a aplicar las condiciones de contorno de Dirichlet.

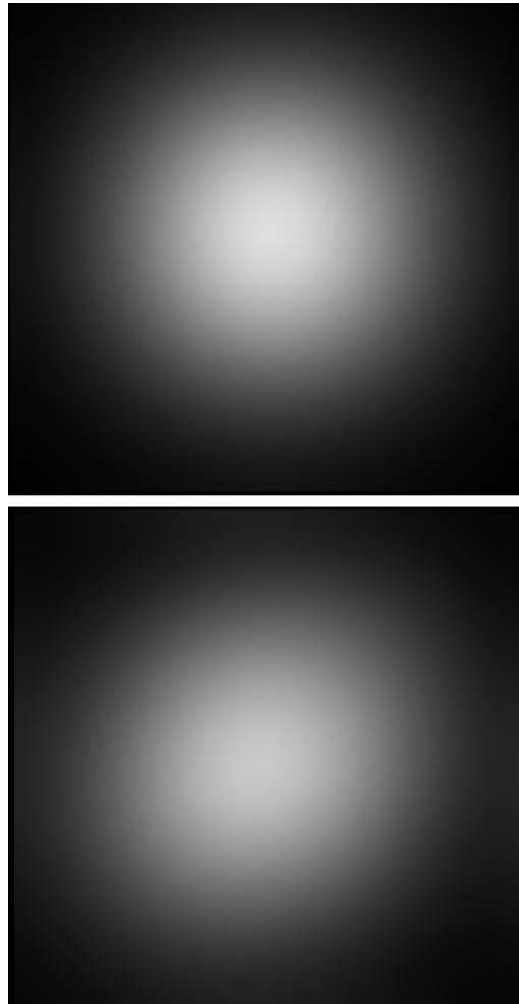


Figura 3.3: Convección uniforme de una magnitud (densidad, p. ej.) tomando una gaussiana por condición inicial (arriba) y condiciones de contorno periódicas. La figura de abajo muestra el resultado después de que la convección ha hecho pasar la distribución 10 veces por el recinto de integración en la dirección diagonal: la difusividad numérica es baja.

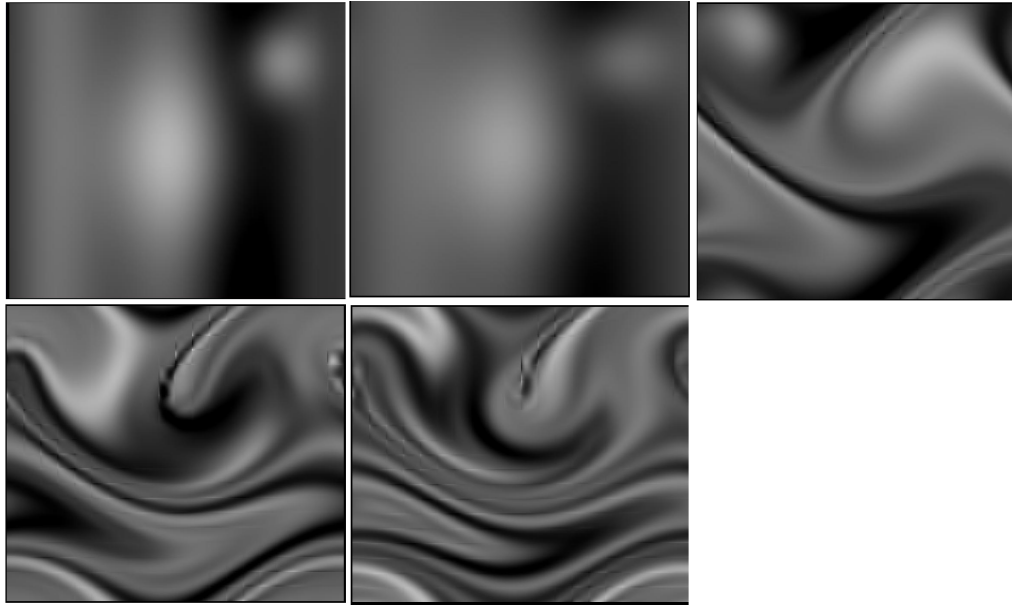


Figura 3.4: Convección no uniforme desde una condición inicial dada y con condiciones de contorno periódicas. Las diferentes figuras muestran la evolución temporal (de izquierda a derecha y de arriba a abajo) en un recinto bidimensional.

hay mayor problema, puesto que no es necesario establecer la condición de contorno: como ya se ha comentado, en las fronteras es necesario resolver un problema de Riemann y, de los dos flujos a cada lado de la frontera, se toma aquél en función del signo del autovalor. Puesto que el flujo sale del recinto, esto quiere decir que el flujo de la frontera se descarta y se toma el proveniente del elemento interior a la frontera. Por otro lado, en las zonas en las que el flujo correspondiente a cierto autovalor entra se toma el flujo de la frontera, el cual depende directamente del valor de la función de distribución en la frontera porque el flujo es función de ella. En estos casos es necesario establecer en el exterior un valor de las cantidades transportadas. Éstas son, en nuestro caso, los coeficientes C_{ij} del desarrollo espectral de f . La opción más sencilla es que la densidad sea nula en el borde. Así, la condición de contorno no es un problema puesto que se puede suponer que fuera de la frontera también será nula y esto se corresponde con tomar un valor nulo para todos los coeficientes C_{ij} .

En el caso en que la densidad en la frontera no sea nula, se puede esta-

blecer un valor fijo constante para la misma en toda la frontera. El problema que queda por resolver es qué valor dar al resto de coeficientes. Físicamente el problema es saber qué forma tiene la función de distribución del plasma mas allá de la última superficie cerrada. Aquí se ha optado por tomar como solución el de una función de distribución maxwelliana con temperatura y densidad fijadas, en manera semejante a lo que se hace en los códigos de transporte unidimensionales. Estas condiciones de contorno ad hoc adoptadas son, en principio, válidas en tanto el problema físico a resolver sea razonablemente local en lo que a coordenada radial se refiere. De hecho la gran mayoría de códigos de transporte son locales en el sentido de que interpretan el flujo como una función exclusiva de los gradientes termodinámicos del plasma (fuentes constantes y fijas) en la misma coordenada radial [10]. Hay que tener en cuenta que la condición de contorno se transporta por convección al interior sólo a través de las derivas (de orden radio de Larmor) ya que no se tiene en cuenta la turbulencia electrostática. Se podría argumentar por tanto que la condición de contorno no debería tener demasiado peso en la solución final salvo para el borde del plasma. En caso contrario, es decir, en el caso en que las cantidades a medir para toda coordenada radial dependan en gran medida de las condiciones de contorno, estaríamos diciendo que el problema es fuertemente no local, lo cual es contrario a la hipótesis de partida.

Si en algún caso se observa la mencionada sensibilidad inusual a las condiciones de contorno, se deja para el futuro un estudio más detallado, puesto que en tal caso el comportamiento de la SOL (*scrape-off layer*) influirá de forma transcendente al interior del plasma y esto queda fuera del objetivo inicial de este código –aunque no de sus capacidades.

3.4. Obtención de soluciones

Si bien en el estado actual del código el avance temporal sólo se ha usado para alcanzar situaciones estacionarias, está previsto que el código se emplee para estudiar la evolución del sistema cuando un estado estacionario se perturba por algún medio. Por lo tanto es necesario tener una evolución temporal bien implementada para su uso posterior. Por otro lado, puesto que algunos de los regímenes estacionarios a alcanzar se obtienen mediante modelos no lineales, el avance temporal implícito puede servir como algoritmo para encontrarlos.

3.4.1. Avance temporal

El avance temporal puede llevarse a cabo de dos maneras: de forma explícita o implícita. Como es bien sabido, los métodos implícitos son estables para cualquier paso temporal pero requieren de la inversión de una matriz, mientras que los explícitos no. También ocurre en el método implícito que añada difusividad numérica a medida que se incrementa el paso temporal. No obstante, para alcanzar estados estacionarios esto no importa mientras la solución matemática al problema estacionario sea única. En tal caso, la solución alcanzada se verá afectada por la difusividad numérica asociada a la discretización espacial, pero no a la discretización temporal, que sólo afectará a la vía por la cual se llega a la solución y a su rapidez en converger a ella.

En el caso explícito se puede optar por un algoritmo de Euler directo simple,

$$C_{ij}^{t_{k+1}} = C_{ij}^{t_k} + \Delta t \left. \frac{\partial C_{ij}(t)}{\partial t} \right|_{t_k},$$

o un Runge-Kutta TVD (o SSP) de orden alto [11, 12].

En el caso implícito se usa un Euler inverso de primer orden:

$$C_{ij}^{t_{k+1}} = C_{ij}^{t_k} + \Delta t \left. \frac{\partial C_{ij}(t)}{\partial t} \right|_{t_{k+1}}.$$

A la hora de invertir la matriz se ha optado por métodos iterativos, puesto que hablamos de matrices dispersas (con muchos ceros) y órdenes por encima de 10.000. Un método directo de resolución (por ejemplo mediante factorización LU) no permite abordar de forma cómoda estas matrices con la capacidad de computación actual. Los iterativos, sin embargo, son ideales en estos casos siempre que la convergencia sea buena, es decir, que se requieran pocas iteraciones para alcanzar la solución. Puesto que la matriz a resolver no es simétrica, se ha elegido un algoritmo de gradientes biconjugados estabilizado [13], que es la versión no simétrica del conocido método de gradientes conjugados (CG) [14, 15].

Cabe mencionar que la convergencia del método iterativo empeora a medida que se incrementa el número de elementos de la malla, el orden de los elementos espectrales o el número de modos en los que se expande la función de distribución. Una posible mejora en el futuro es garantizar una correcta convergencia mediante el uso de un preconditionador: éste consiste en conocer

una solución aproximada de la matriz a resolver, mediante una aproximación poco costosa de la inversa de dicha matriz. Un método podría ser usar un código de transporte 1D como preconditionador del 3D⁴.

3.4.2. Estados estacionarios

Ya se ha comentado que en las primeras aplicaciones del código sólo se han buscado estados estacionarios, y que se utiliza el avance temporal implícito como método para alcanzarlos. Se podría pensar que esto no es lo más adecuado y que, para problemas lineales, sería mejor invertir la matriz del sistema correspondiente a $\partial_t = 0$. No obstante, como también se ha comentado, el número de condición de la matriz es grande y eso significa una mala convergencia debido a la existencia de autovalores muy pequeños. Incluso se puede dar en determinadas circunstancias la existencia de autovalores nulos que deben ser eliminados antes de la resolución del sistema. Es cierto que tal vez se pueda encontrar un método más eficiente, pero el uso de la evolución temporal para alcanzar soluciones estacionarias ofrece buenas características de convergencia sin introducir componentes asociadas a autovalores nulos siempre que no existan en la condición inicial (normalmente nula), además de poder abordar problemas con cierto carácter no lineal sin demasiados problemas. En un futuro podrían estudiarse técnicas más complejas en las que intervenga la descomposición espectral de la matriz y un estudio exhaustivo de la misma, o bien métodos iterativos tipo GMRES[16] que garantizan la solución de mínimo residuo.

Una cuestión interesante es el avance de los electrones. En el caso de querer encontrar una solución estacionaria, y no importando el modo en que se alcanza, se acelera el cálculo y se mejora la convergencia de la matriz si el paso temporal de los electrones se hace más corto que el de los iones: en concreto se toma $\Delta t_i = \sqrt{\frac{m_i}{m_e}} \Delta t_e$, puesto que la velocidad térmica electrónica es $\sqrt{\frac{m_i}{m_e}}$ veces la iónica para una misma temperatura. Como la dinámica electrónica es mucho más rápida que la iónica, con esto se evita una lenta convergencia a la solución al utilizar el avance temporal. Es fácil ver con el siguiente ejemplo que la solución estacionaria es la misma. Aquí usamos subíndices respectivos e, i para referirnos a electrones e iones.

⁴Relacionado con esto está la gran dispersión espectral de los autovalores (número de condición), que se debe a la diferencia enorme entre transporte paralelo y perpendicular.

Sea el problema lineal de avance tal que:

$$\left. \frac{\partial \begin{bmatrix} C_i(t) \\ C_e(t) \end{bmatrix}}{\partial t} \right|_{t_0} = \begin{bmatrix} M_{ii} & M_{ie} \\ M_{ei} & M_{ee} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_i(t) \\ C_e(t) \end{bmatrix}.$$

El problema del estacionario:

$$\frac{\partial \begin{bmatrix} C_i \\ C_e \end{bmatrix}}{\partial t} = 0$$

es equivalente a:

$$\begin{bmatrix} M_{ii} & M_{ie} \\ M_{ei} & M_{ee} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_i^{t_0} \\ C_e^{t_0} \end{bmatrix} = 0.$$

Apliquemos, para alcanzar la solución, un Euler inverso con pasos temporales diferentes para iones y electrones:

$$\begin{bmatrix} C_i^{t_0+\Delta t_i} \\ C_e^{t_0+\Delta t_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_i^{t_0} \\ C_e^{t_0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Delta t_i M_{ii} & \Delta t_i M_{ie} \\ \Delta t_e M_{ei} & \Delta t_e M_{ee} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_i^{t_0+\Delta t_i} \\ C_e^{t_0+\Delta t_e} \end{bmatrix}$$

Al llegar a un estacionario se cumple que

$$\begin{bmatrix} C_i^{t_0} \\ C_e^{t_0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_i^{t_0+\Delta t_i} \\ C_e^{t_0+\Delta t_e} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_i \\ C_e \end{bmatrix}$$

y el Euler inverso da como resultado

$$\begin{bmatrix} \Delta t_i M_{ii} & \Delta t_i M_{ie} \\ \Delta t_e M_{ei} & \Delta t_e M_{ee} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_i \\ C_e \end{bmatrix} = 0,$$

que simplificando los factores Δt es equivalente a resolver el problema estacionario. La demostración para el caso no lineal es equivalente, pero sustituyendo las matrices por operadores. La dinámica obtenida aplicando distintos pasos de tiempo no será la correcta pero, como se argumentaba al principio de este apartado, esto no es un problema para obtener estados estacionarios.

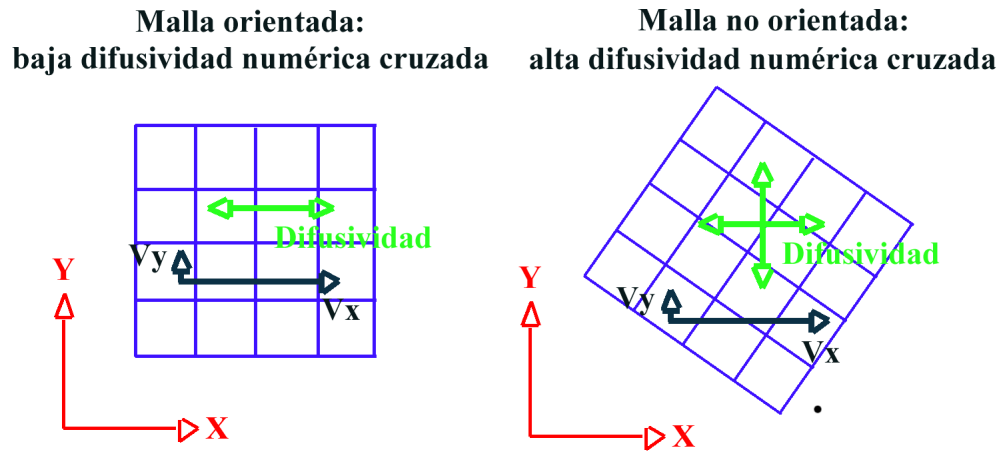


Figura 3.5: Ejemplo de malla bidimensional orientada correctamente: mínima difusividad numérica (izquierda); y orientada incorrectamente: alta difusividad numérica cruzada (derecha). Se simboliza con flechas la desproporción entre las velocidades de convección en cada eje.

3.5. Mallado

Como se comentó en la sección (3.2), el método sufre de cierta difusividad numérica que, si bien se reduce a medida que se incrementa el orden de las bases, sigue existiendo. Una propiedad de la difusividad numérica es que si la malla está orientada en la dirección de la velocidad, no existe difusividad numérica en las direcciones ortogonales. Veamos un ejemplo en el plano 2D para aclararlo:

Malla incorrectamente orientada Si la velocidad de convección en la dirección coordenada mediante x es mucho más intensa que la existente en la y , el que la malla consista en cuadrados orientados incorrectamente en el plano x - y (figura 3.5, dcha.) implica un acoplamiento de las difusividades. Esto quiere decir que la convección asociada a la velocidad en el eje x va a generar difusividad numérica en ambos ejes, pues si la malla no está correctamente orientada relativa al vector velocidad de convección, la convección en una dirección implica difusividad en todas las direcciones. Considerando que la convección es dominante en la dirección x , el efecto de la difusividad numérica en esa dirección es comparativamente despreciable. Pero esta di-

fusividad pequeña con respecto a la velocidad en el eje x puede originar un transporte grande comparado con la convección debida a la velocidad física en el eje y . Entonces la difusividad cruzada, la generada por la convección en el eje x pero sufrida en el eje y , es comparable a la convección en el eje y . La dinámica en el eje y resulta falseada por el método numérico.

Malla correctamente orientada Por otro lado, si la malla está correctamente orientada (figura 3.5, izda.), la componente de velocidad v_x generará difusividad numérica en el eje x pero *no* en el eje y , puesto que la orientación correcta de los elementos de malla evita el acoplamiento de difusividades. Esto implica que, aunque las velocidades v_x y v_y sean muy diferentes, no va a haber un acoplamiento numérico entre ellas que impida el estudio de la dinámica más lenta.

El efecto de la orientación se puede apreciar en la simulación bidimensional llevada a cabo mediante SDM en la figura 3.6. En ella se integra la ecuación $\partial_t f = \nabla \cdot (f\mathbf{v})$ donde el campo \mathbf{v} es de módulo constante y sigue la dirección vertical con un pequeño rizado horizontal. Las condiciones de contorno son periódicas. Inicialmente se tiene una distribución de la densidad como la mostrada en el panel izquierdo. Para exagerar la difusividad numérica se ha usado orden 1 (el orden más bajo) para describir f en cada celda, es decir, f es constante dentro de cada celda. Conforme avanza t , la distribución se mueve hacia arriba en la figura siguiendo las líneas de \mathbf{v} . El panel del medio muestra un tiempo posterior en el que la distribución está “saliendo” por arriba y “entrando” por abajo. Ya se aprecia que la distribución inicial ha variado su forma debido a la difusividad numérica –pues la ecuación que se integra sólo daría lugar a un desplazamiento de la distribución inicial. Al cabo de suficientes iteraciones, la distribución inicial se ha difundido siguiendo la malla a lo largo de la dirección paralela, pero no de la perpendicular.

Todo lo anterior encuentra su sentido cuando hablamos del problema del transporte, donde la componente radial es mucho menor que la paralela, y hay que tener cuidado con que no existan artefactos numéricos que acoplen ambos transportes y contaminen la solución física. Para evitarlos sería deseable tener una malla orientada según la convección intensa. En nuestro problema este aspecto queda bien definido, especialmente en la aproximación de pequeño radio de Larmor inherente a las ecuaciones que se desea resolver: la convección intensa se encuentra en las superficies magnéticas, donde habi-

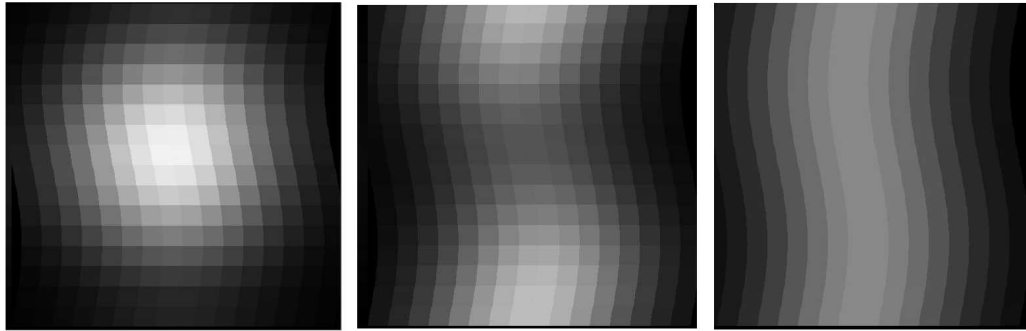


Figura 3.6: Evolución temporal (de izquierda a derecha) de la convección en una malla correctamente orientada con respecto a la velocidad. La condición inicial es una gaussiana y la velocidad se ha tomado en el eje y (vertical) con un ligero rizado en el x (horizontal). La difusividad paralela provoca la homogeneización a lo largo de las líneas de flujo, pero no en la dirección perpendicular, ya que la malla sigue las líneas de flujo.

ta el transporte paralelo. Al mismo tiempo, el SDM requiere que las mallas sean conformes, es decir, que los nodos de los elementos coincidan entre sí (figura 3.7). Para cumplir estos dos requisitos (mallas orientadas y conformes) se ha implementado un software gráfico que ayuda a generar las mallas correspondientes a una geometría magnética dada. Esta parte aneja al código es crucial para convertirlo en una herramienta útil en cualquier geometría toroidal: el software de mallado hace de puente entre la solución numérica de la ecuación cinética y la máquina de confinamiento magnético cuyo plasma se desea estudiar. Las figuras que siguen se basan en la geometría magnética del Helic TJ-II e ilustran la potencia del software para adaptarse a una geometría compleja. El proceso de generación de mallas es el siguiente:

1. El usuario debe facilitar una función que defina el campo magnético a partir de un punto espacial (x, y, z) . Su cálculo es independiente del software y puede ser analítico o mediante interpolación en una malla precalculada.
2. A partir del campo magnético, se toma un punto del espacio seleccionado por el usuario manualmente y se sigue la línea de campo durante un número de vueltas al toro (obviamente la máquina debe ser topológicamente un toro). El usuario es el encargado de encontrar una superficie

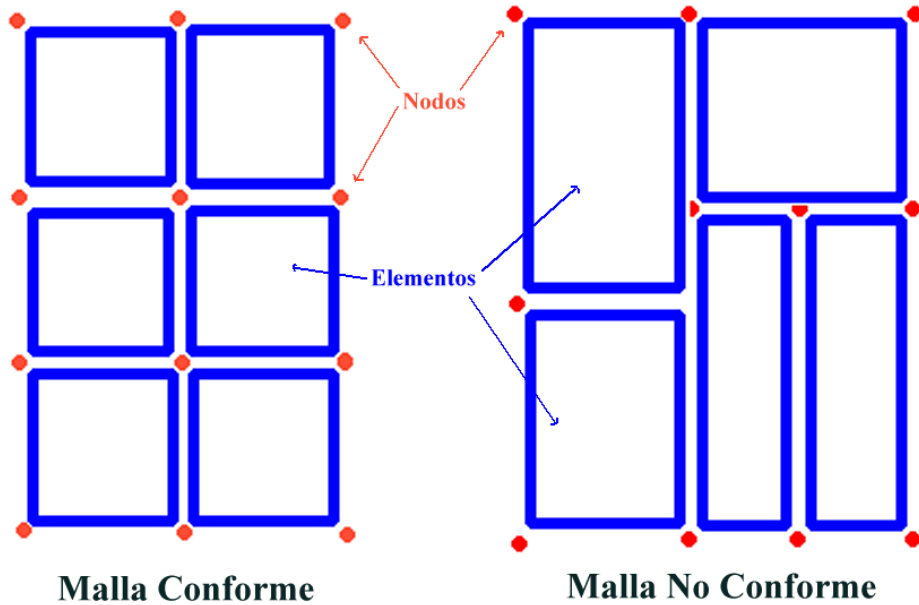


Figura 3.7: Diferencia entre mallas conformes y no conformes.

magnética cuya transformada rotacional sea un número racional, es decir, que tras dar k vueltas al toro se cierre sobre sí misma la curva. Esta labor no se ha automatizado porque en el caso de campos magnéticos no analíticos, obtenidos mediante interpolación en una malla precalculada, el cierre de la línea de campo tras k vueltas puede tener varias soluciones, o incluso no ocurrir de forma exacta. El usuario es el encargado de juzgar si el cierre es suficientemente correcto o no (figura 3.8).

- De las anteriores trayectorias en superficies racionales de la transformada rotacional, el software tomará los puntos de corte de la línea de campo con el plano definido por un ángulo toroidal ϕ constante (esto es el diagrama de Poincaré). Dichos puntos se usarán como nodos en una interpolación trigonométrica del tipo:

$$\vec{r} = \sum_i \vec{A}_i \sin(2\pi i\alpha) + \sum_i \vec{B}_i \cos(2\pi i\alpha) \quad (3.6)$$

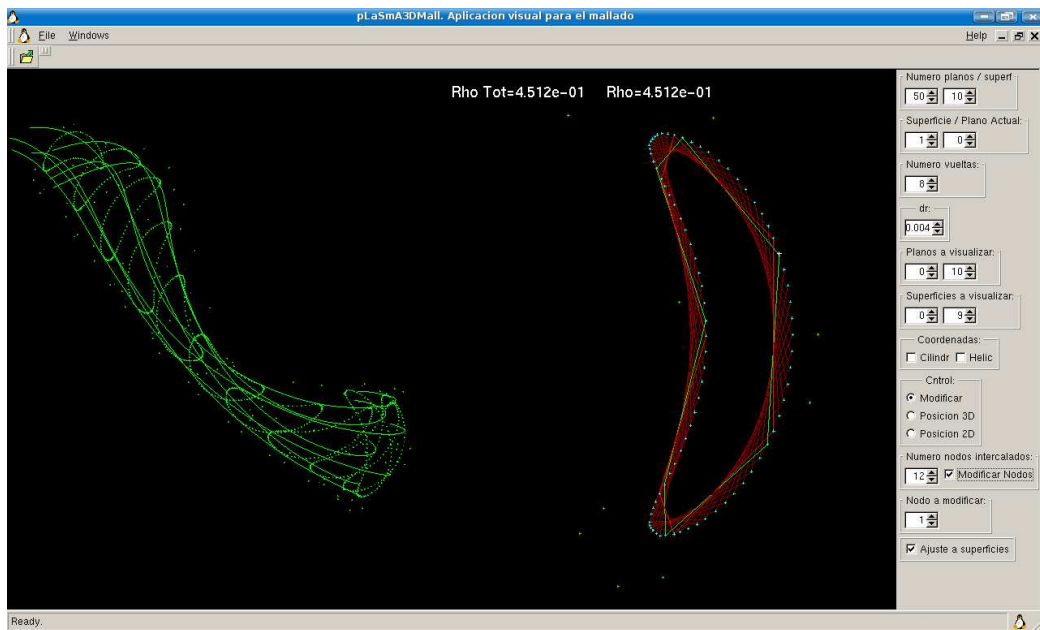


Figura 3.8: Seguimiento de línea de campo. A la izquierda visión 3D, a la derecha sección de Poincaré para un corte toroidal ϕ dado.

que servirá para definir un corte de la superficie magnética en dicho plano de ϕ . Lo mismo se repite para diferentes planos y así obtener secciones de la superficie magnética (figura 3.9).

4. El mismo proceso de encontrar una superficie racional se repite en tantas superficies como coronas radiales se requieran para caracterizar correctamente la máquina o los gradientes del problema.
5. Una vez obtenidas las superficies magnéticas de forma aproximada, se establecerá el número de elementos de malla que queremos. Para ello, cada corona se rellenará con $N \times M$ elementos en ambas direcciones poloidal y toroidal. Puesto que previamente se conocen los puntos que definen la superficie magnética, es fácil obtener los nodos de los elementos de la malla (figura 3.10).
6. Además, el código es flexible a la hora de añadir una transformada rotacional a los elementos y permitir que la malla siga siendo conforme. Veamos esto con más detalle: si los elementos de malla siguieran el

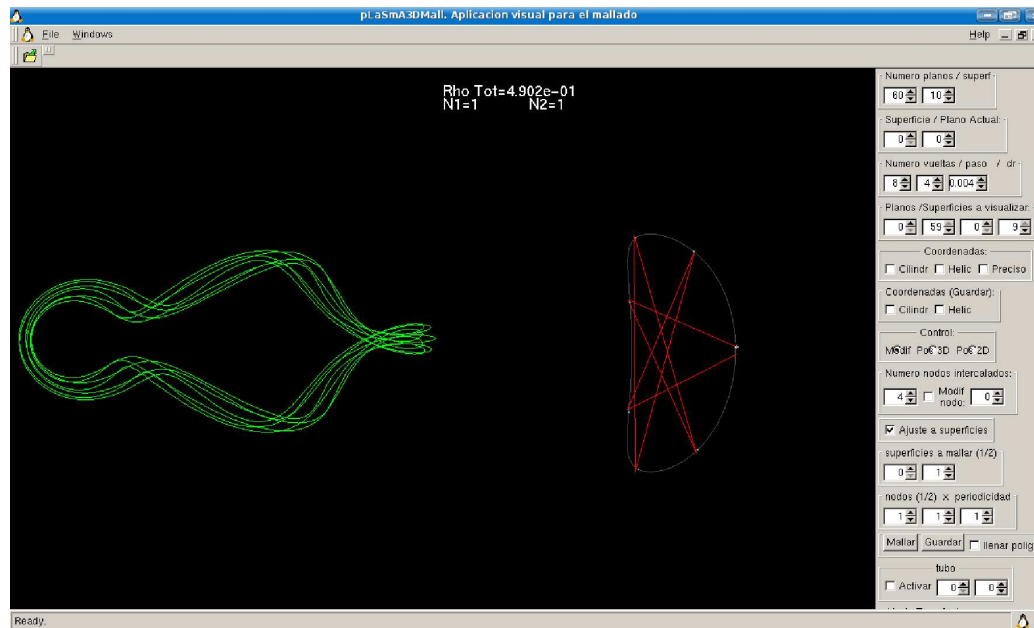


Figura 3.9: Ejemplo sencillo en el que se ve cómo se realiza la interpolación trigonométrica en un plano de ϕ concreto (en gris) a partir de pocos puntos obtenidos mediante seguimiento de la línea de campo (en rojo).

campo magnético de forma exacta, al dar una vuelta toroidal no coincidirían con ninguno de los nodos de partida, salvo que la transformada rotacional del plasma fuese constante y del valor racional apropiado. Esto daría una malla no conforme. Lo que hace el software es obviar la transformada rotacional del campo magnético y generar una transformada rotacional constante para todos los elementos de malla lo más cercana posible a la del plasma (figura 3.11). Por así decirlo, la “cizalla magnética” del mallado es prácticamente nula.

El resultado es una malla correctamente orientada en la dirección radial (es decir, no hay acoplo entre transporte radial y paralelo) y que sigue aproximadamente las líneas de campo magnético. El hecho de que la malla no tenga exactamente la misma transformada rotacional que las líneas de campo magnético no significa que el cálculo sea erróneo o mal aproximado, ya que posteriormente la convección se efectuará con el campo magnético real: la malla es independiente de la simulación, salvo por la cuestión de la difusividad numérica. Se podría decir que las coordenadas locales de los elementos

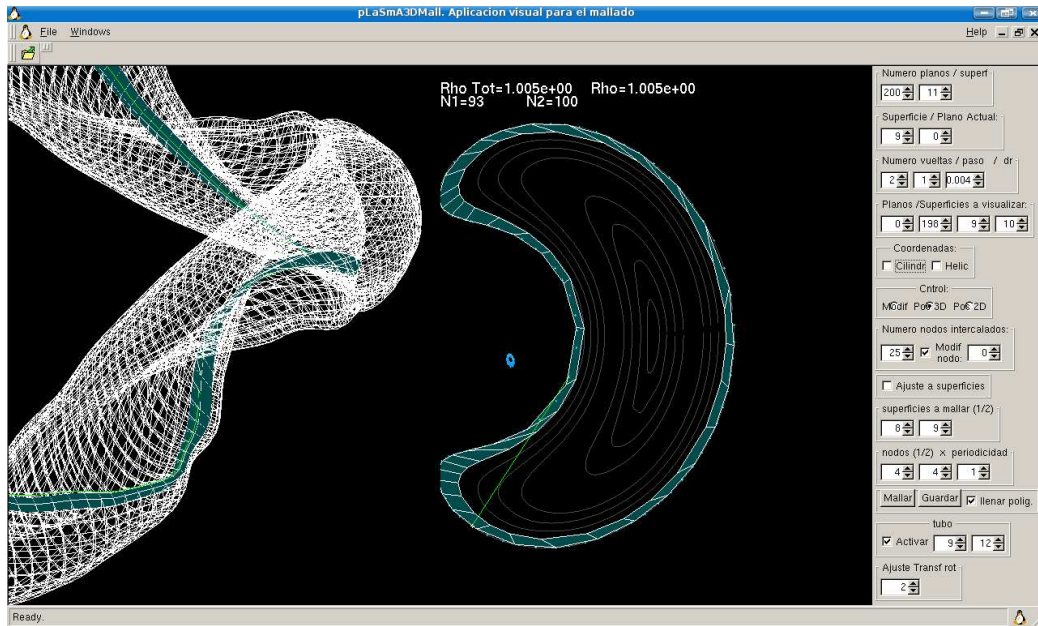


Figura 3.10: Proceso de mallado. En gris se observan secciones para un plano de ϕ concreto de las diferentes superficies magnéticas. Igualmente se puede apreciar el mallado de la corona exterior.

de malla son “casi-magnéticas” (figura 3.11). Obsérvese que si tenemos una cizalla magnética alta, como sucede normalmente con los campos magnéticos de *tokamak*, el mallado no será paralelo al campo magnético en la mayoría de las coronas radiales, pero se seguirá preservando el requisito de que la convección intensa permanezca en las superficies de flujo.

Puesto que la geometría magnética se ha obtenido por medio de polinomios de interpolación trigonométrica (Ec. 3.6) que son analíticos, dicha geometría puede usarse para obtener los jacobianos de la transformación de coordenadas globales a coordenadas locales en cada elemento, requeridos por el SDM.

El resultado de todo esto son mallas como las mostradas en las figuras 3.12 y 3.13.

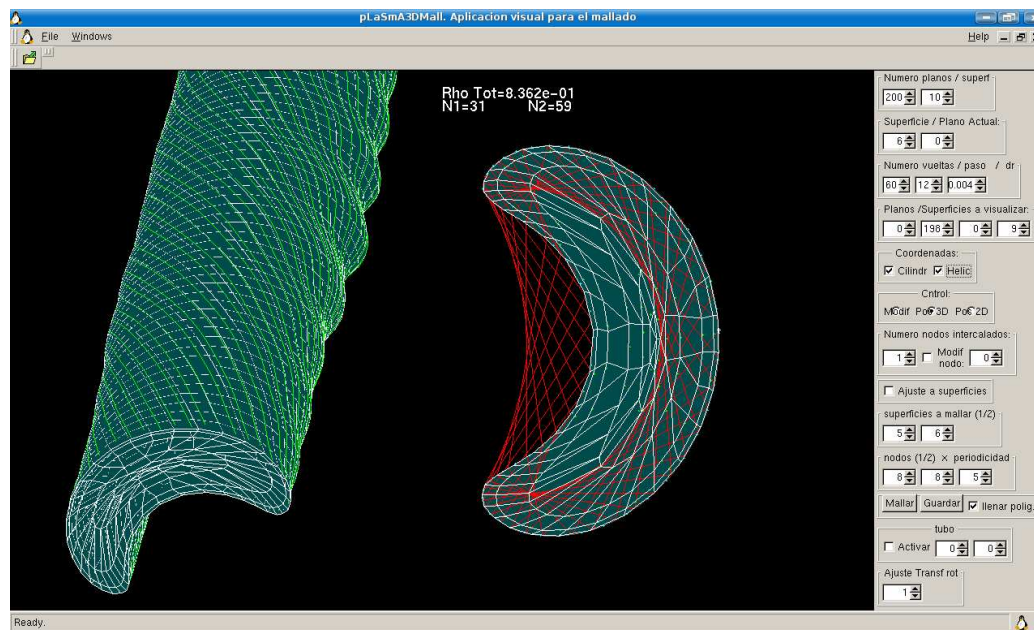


Figura 3.11: Se puede observar cómo la malla (líneas blancas) sigue tanto el rizado como las líneas de campo magnético (líneas verdes) de forma aproximada.

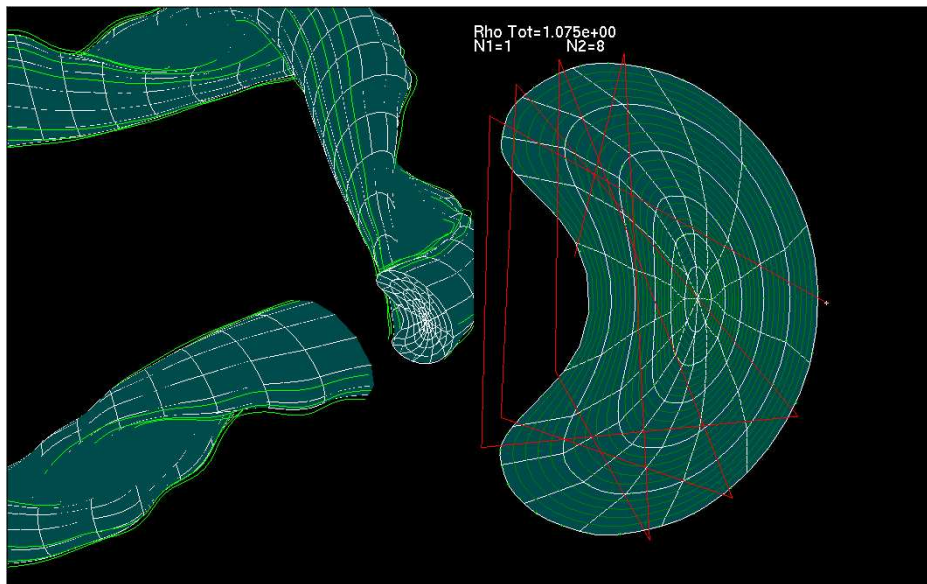


Figura 3.12: Ejemplo de malla para una configuración magnética del TJ-II.

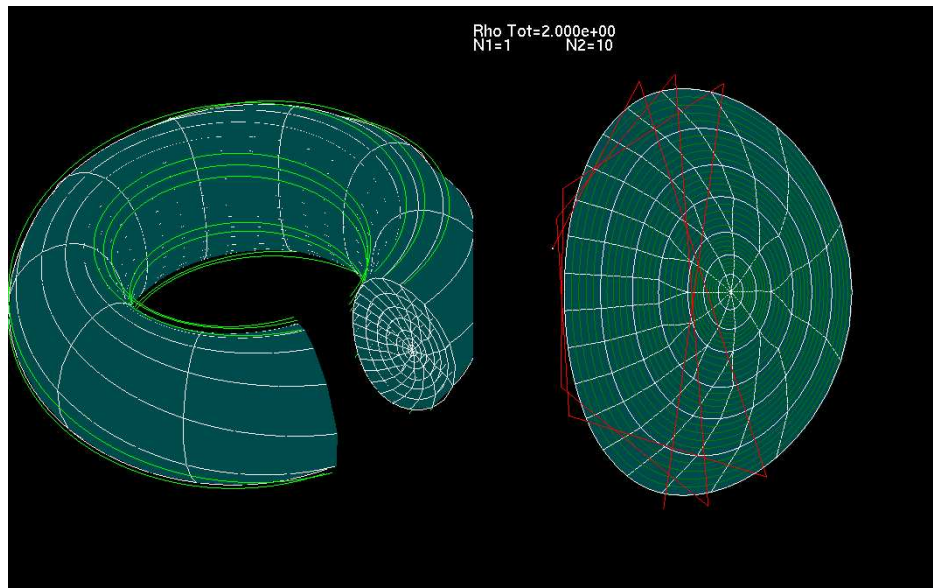


Figura 3.13: Ejemplo de malla para un *tokamak*.

3.6. Paralelización

Aunque la distribución del cálculo en distintos procesadores no es en este código tan clara como, por ejemplo, en los códigos Monte-Carlo, se han previsto esquemas de paralelización con objeto de aprovechar bien los recursos de hardware. La paralelización del código depende del algoritmo de integración temporal: explícito o implícito.

Avance explícito En este caso la paralelización es trivial: se reparten grupos de elementos de malla entre los procesadores, de modo que cada uno se encargue de todo lo relativo a su grupo de elementos. La parte convectiva es la única que requiere el conocimiento de cantidades en los elementos de malla vecinos, en concreto del flujo. Basta por tanto con compartir entre procesadores el valor del flujo en las interfaces de los elementos vecinos que están en diferentes procesadores.

Por el momento, a la hora de compartir grupos de elementos, se hace por cortes toroidales (figura 3.14) puesto que es la más simple. Si es necesaria una mayor paralelización en un futuro se pueden enviar a cada procesador

coronas independientes.

Puesto que el método es de elementos espectrales, para obtener una buena eficiencia en la paralelización se puede optar por órdenes polinómicos relativamente altos (3–4). Con ello el número de elementos para alcanzar una precisión requerida es menor y eso obliga a que la mayor parte del cálculo se realice dentro de cada elemento, siendo por tanto el coste de envío del valor del flujo en las discontinuidades una cantidad de menor importancia. Veamos esto con mayor detalle en un ejemplo:

Supongamos que el campo eléctrico y el magnético están fijados durante la simulación y la única comunicación entre elementos de la malla es el flujo de convección. Sea el orden de interpolación espacial N_p y el de la expansión espectral N_v . El número de datos a compartir entre dos elementos de malla en cada iteración es proporcional a $N_p^2 N_v$ (es decir, el número de nodos en una superficie espacial por el número de modos de velocidad). Este coste de comunicación es bidireccional por parte de los elementos vecinos, ya que cada uno requiere el flujo del otro. Por otro lado, el coste computacional en el interior del elemento de malla crece proporcionalmente a $N_p^3 N_v^2$. Para una precisión requerida, es equivalente tener menos elementos de malla y un mayor orden de interpolación. Por tanto, si reducimos el número de elementos y aumentamos el orden N_p , el crecimiento del cálculo dentro del elemento crece más rápido que el de comunicación, y llegará un punto (en función de la arquitectura de computación) en que el tiempo de comunicación sea despreciable frente al de cálculo. Vemos por tanto que el método es flexible en este sentido.

Avance implícito En el caso de avance temporal implícito, tanto el número de procesadores como el modo en que se reparten las variables entre los nodos es flexible. Ya se ha comentado que la esencia del avance implícito es obtener la solución a un sistema de ecuaciones a partir de una matriz que debe ser invertida. La paralelización se lleva a cabo dividiendo la matriz del sistema de ecuaciones entre todos los procesadores. Un paso del algoritmo iterativo consiste en que cada procesador aplique su “trozo” de matriz al vector de incógnitas que al final debe poseer la solución del sistema. Al final de cada paso del algoritmo, los procesadores deben comunicarse los unos con los otros para saber los cambios sobre el vector de incógnitas efectuado por los otros. No obstante, debido a que la matriz no es densa sino que tiene muchos elementos nulos, realmente no todos los procesadores requieren la informa-

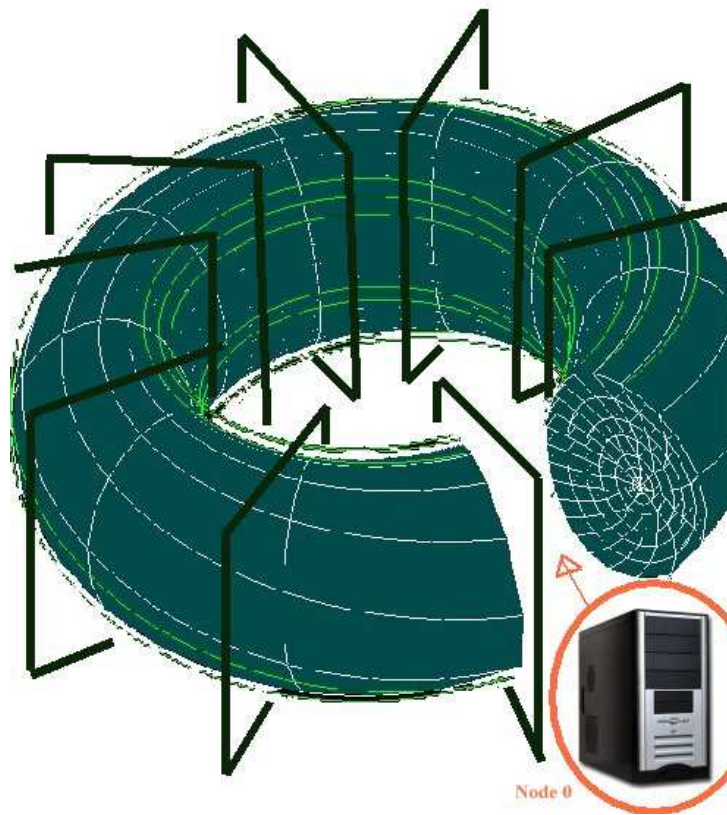


Figura 3.14: Separación de la malla en elementos que se envían a cada procesador.

ción del vector completo de incógnitas. Por ejemplo, las variables asociadas a un elemento de la malla sólo necesita la información de los elementos vecinos. Así, se puede llevar a cabo una redistribución inteligente de la matriz (y por tanto de las incógnitas) de modo que no sea necesario comunicar a todos los demás procesadores las modificaciones sobre el vector de incógnitas, sino sólo a algunos de ellos. Con ello la comunicación entre nodos se reduce y se aumenta la eficiencia de paralelización. La flexibilidad del algoritmo iterativo desarrollado viene por tanto de la capacidad de redistribución de variables entre los procesadores de forma arbitraria. En función de la red hardware de comunicación y de la mencionada “necesidad” de cada procesador por las variables de los demás, se puede obtener un buen rendimiento.

Referencias

- [1] H. Grad, *On the kinetic theory of rarefied gases*, Commun. Pure Appl. Math. **2**, 325 (1949)
- [2] R. Balescu, *Transport Processes in Plasmas. 1. Classical transport theory*, ISBN 0 444 87091 1, Physical Sciences and Engineering Division, pp 176 (1988).
- [3] McNamara and G. Zanetti, *Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata*, Phys. Rev. Lett., **61**, 2332 (1988).
- [4] Xiaoyi He, Li-Shi Luo, *A priori derivation of the lattice Boltzmann equation*, Phys Rev. E, **55**(6), 6333 (1997).
- [5] Y. Sun, Z. J. Wang, Y. Liu, *High-Order Multidomain Spectral Difference Method for the Navier-Stokes Equations*, AIAA-2006-0301 (2006).
- [6] D. A. Kopriva, *A conservative staggered-grid Chebyshev multidomain method for compressible flows. II. A semi-structured method*, J. Comp. Phys. **128**, 475 (1996).
- [7] S. K. Godunov, *A difference scheme for numerical computation of discontinuous solution of hyperbolic equation*, Math. Sbornik **47**, 271 (1959).
- [8] P. L. Roe, *Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes*, J. Comp. Phys. **43**, 357 (1981).
- [9] C. Liang, S. Premasuthan, A. Jameson, Z. J. Wang, *Large Eddy Simulation of Compressible Turbulent Channel Flow with Spectral Difference Method*, AIAA-2009-402 (2009).

-
- [10] F. L. Hinton, R. D. Hazeltine, *Theory of plasma transport in toroidal confinement systems*, Rev. Mod. Phys. **48**(2), 239 (1976).
- [11] C. W. Shu, *Total-variation-diminishing time discretizations*, SIAM J. Sci Stat. Comput. **9**, 1073 (1998)
- [12] R. K. Spiteri, S. J. Ruuth, *A new class of optimal high-order strong-stability-preserving time discretization methods*, SIAM J. Numer. Anal. **40**, 469 (2002).
- [13] van der Vorst, H. *Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems* SIAM J. Sci. Statist. Comput. **13**, 631 (1992).
- [14] John K. Reid, *On the Method of Conjugated Gradients for the Solution of Large Sparse Systems of Linear Equations, Large Sparse Sets of Linear Equations* (London and New York) (John K. Reid, ed.) Academic Press, London and New York, pp. 231 (1971).
- [15] Eduard Stiefel, *Über einige Methoden der Relaxationsrechnung*, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik **3**(1), 1 (1952).
- [16] Y. Saad, M. H. Schultz, *GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci. Stat. Comput. **7**, 856 (1986).

Capítulo 4

Convergencia y comprobaciones: tokamak axisimétrico

En capítulos anteriores se han introducido el fundamento teórico y los aspectos numéricos del código. Procede ahora presentar los primeros estudios de convergencia y hacer comparaciones con la teoría. Lo último es difícil y poco concluyente si no se acude a los supuestos más sencillos. En el caso del código que nos ocupa, concebido para estudiar plasmas confinados magnéticamente en geometría toroidal general, tales supuestos corresponden al transporte neoclásico en campos axisimétricos de *tokamak* con sección transversal circular. Como corresponde a un código numérico de gran complejidad, sus resultados habrán de ser revisados críticamente de manera continuada, pero el objetivo de este capítulo es establecer la base de posteriores comprobaciones.

En lo que sigue empezaremos describiendo las condiciones de las simulaciones numéricas (sección 4.1) y haremos explícitos los términos de comparación con la teoría (sección 4.2), para pasar a estudiar la convergencia en función de la precisión espacial y en espacio de velocidades del código (sección 4.3). Acabaremos con el objetivo propuesto: comparar resultados numéricos y teóricos (sección 4.4) en las condiciones previamente descritas.

4.1. Condiciones de trabajo

4.1.1. Geometrías magnéticas

Como se apuntaba en la Introducción, para poder efectuar las primeras comparaciones es fundamental reducir el estudio a una geometría magnética sencilla. La parte de este informe dedicada a la comparación con los modelos teóricos de transporte colisional se basa en dos modelos de *tokamak* con simetría axial que denominamos simplemente Tokamak-I y Tokamak-II (abreviados T-I y T-II respectivamente), cuya diferencia esencial es que T-II es de sección circular. La mayoría de las simulaciones se efectuarán con T-II por su sencillez, si bien T-I se comporta de forma muy parecida.

En los *tokamak*, el confinamiento se debe al campo magnético generado externamente por bobinas junto al campo asociado a la corriente del propio plasma. Este último es necesario para que haya una transformada rotacional¹, sin la que el confinamiento es imposible en una geometría toroidal. Gran parte de dicha corriente procede de la fuerza electromotriz inducida desde el exterior mediante variación del flujo magnético, si bien la llamada corriente de *bootstrap* [1], generada por el propio plasma, puede proveer un porcentaje considerable de la corriente necesaria [2]. El *tokamak* opera en torno a un equilibrio magnetohidrodinámico (MHD) en el que los campos magnéticos externos e internos son consistentes con la presión del plasma. En las condiciones relevantes para este trabajo podemos usar las ecuaciones de la MHD ideal con flujos de plasma nulos: $\nabla p = \mathbf{J} \times \mathbf{B}$, de manera que la fuerza termodinámica debida al gradiente de la presión, p , y la fuerza de Lorentz expresada colectivamente a través de la densidad de corriente del plasma, \mathbf{J} , y el campo magnético \mathbf{B} , deben estar equilibradas. Aquí vemos que la propia presión puede servir de coordenada “radial”, pues normalmente disminuye monótonamente desde el centro del plasma y el campo magnético es perpendicular a ∇p . Por este motivo, pueden de igual manera usarse otras coordenadas radiales ψ tales que $p = p(\psi)$. Las otras dos ecuaciones en las que se basa la MHD ideal son $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}$ y $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ (puede consultarse el artículo recopilatorio [3]).

Considerando un radio cilíndrico R referido al eje mayor del toro, es sabido que el equilibrio MHD es solución a la denominada *ecuación de Grad-*

¹ En la literatura sobre *tokamak* es común usar su inversa, el llamado *factor de seguridad*, q , una función dependiente de la superficie de flujo que relaciona la intensidad promedio de los campos toroidal y poloidal en ella.

Shafranov (Ec. 7.10 en [4] y [5]),

$$R^2 \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \psi}{R^2} \right) = -\mu_0 R^2 \frac{dp}{d\psi} - I \frac{dI}{d\psi}, \quad (4.1)$$

donde $I = I(\psi)$ es una función relacionada con la corriente poloidal del plasma, ψ es la función poloidal (equivalente al flujo magnético poloidal, ψ_{pol} , dividido por 2π y que más adelante se usará como coordenada pseudorradial) y μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío.

Es sabido que la Ec. 4.1 presenta algunos casos límite sencillos, por ejemplo cuando $dp/d\psi$ y $dI/d\psi$ son proporcionales a ψ (si la presión del plasma es suficientemente baja). Nos basaremos en esto para construir geometrías magnéticas consistentes con un equilibrio MHD, como se hace a menudo en la teoría del transporte neoclásico. Obsérvese que el operador del miembro izquierdo de la Ec. 4.1 involucra derivadas con respecto a la coordenada cilíndrica z ,

$$R^2 \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \psi}{R^2} \right) = R \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R} \frac{\partial \psi}{\partial R} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}.$$

La solución a la ecuación de Grad–Shafranov es la función $\psi(R, z)$ mediante la cual puede construirse el campo magnético axisimétrico \mathbf{B} compatible con la condición de equilibrio $\nabla p = \mathbf{J} \times \mathbf{B}$ y, como vemos (Ec. 4.1), el equilibrio bidimensional (axisimétrico) depende de los perfiles de presión y corriente poloidal –condiciones de contorno aparte–, que pueden en principio tomarse como grados de libertad independientes.

Tokamak I (T-I)

Si en el volumen del plasma $dI/d\psi$ y $dp/d\psi$ son constantes, se tiene uno de los pocos casos en los que la Ec. 4.1 puede resolverse analíticamente. Con estos supuestos, la función poloidal solución es (Ec. 7.11 en [4]),

$$\psi = \frac{\psi_{\text{pol}}}{2\pi} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \nabla \theta \cdot \mathbf{B} dV = \frac{\psi_0}{R_0^4} \left[(R^2 - R_0^2)^2 + \frac{z^2}{E^2} (R^2 - R_x^2) - \tau R_0^2 \left(R^2 \ln \frac{R^2}{R_0^2} - (R^2 - R_0^2) - \frac{(R^2 - R_0^2)^2}{2R_0^2} \right) \right], \quad (4.2)$$

donde R_0 es el radio mayor del plasma y ψ_0 es una constante que define la magnitud de ψ . También hemos usado la relación

$$\psi_{\text{pol}} = \int_{\text{sup. poloidal}} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{volumen}} \mathbf{B} \cdot \nabla \theta dV.$$

Las constantes R_x , E y τ caracterizan las superficies de flujo. En concreto para este ejemplo vamos a tomar $\tau = 0$, es decir, un plasma cuyas secciones toroidales para las superficies magnéticas tienden a ser elipses concéntricas conforme $\psi \rightarrow 0$ (cuando $E = 1/2$ estas secciones tienden a circulares). Tomaremos también $R_x = 0$, pues esta constante viene a ser la posición radial donde empieza la región de superficies anidadas. La función poloidal se puede expresar entonces como

$$\psi = \frac{\psi_0}{R_0^4} \left[(R^2 - R_0^2)^2 + \frac{z^2}{E^2} R^2 \right]. \quad (4.3)$$

En la figura 4.1 vemos los contornos de ψ que corresponden a esta ecuación usando parámetros que encontraremos a continuación.

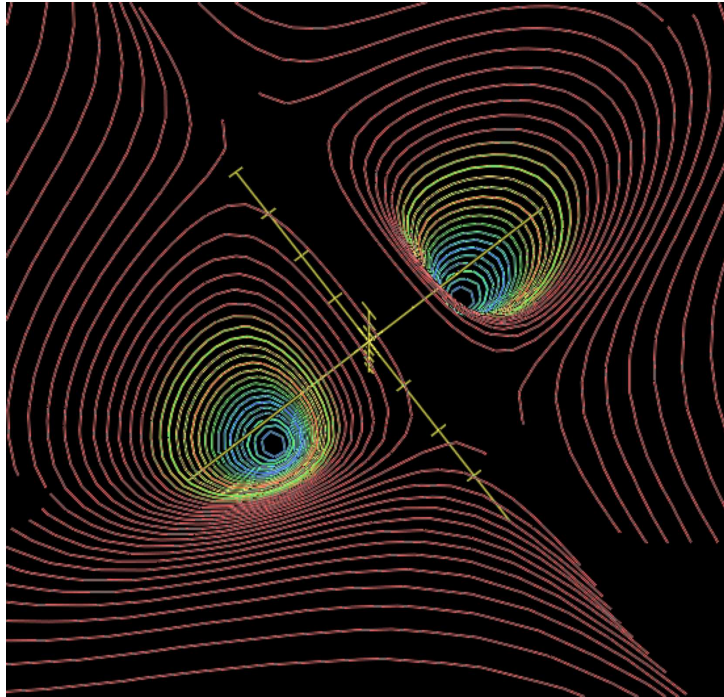


Figura 4.1: Solución analítica Ec. 4.3 a la ecuación de Grad-Shafranov. Se muestran los ejes de las coordenadas R y z en perspectiva, con ψ en la dimensión vertical. $R_0 = 2,8$, $\psi_0 = 0,525$, $E = 1/2$.

Cerca del eje magnético ($R \rightarrow R_0$ y $z \rightarrow 0$), la Ec. 4.3 se puede aproximar

por

$$\psi = 4 \frac{\psi_0}{R_0^2} \left((R - R_0)^2 + \frac{z^2}{4E^2} \right), \quad (4.4)$$

donde se ve más claramente que allí las secciones en el plano toroidal son elipses cuya relación de ejes depende de E . Si, además, $E = 1/2$, la función de flujo poloidal puede expresarse sencillamente en función del radio menor del toroide, $\rho = \sqrt{(R - R_0)^2 + z^2}$:

$$\psi = 4 \frac{\psi_0}{R_0^2} \rho^2, \quad (4.5)$$

de manera que el radio geométrico ρ sirve también como coordenada para las superficies magnéticas. La condición de “proximidad al eje magnético” puede interpretarse como una condición de alta relación de aspecto $A = R_0/\rho \gg 1$.

Una vez obtenida una geometría para las superficies de flujo, o funciones $\psi(R, z)$, vamos a construir el campo magnético que usaremos en los cálculos. En términos generales, un campo magnético axisimétrico puede expresarse según sus componentes a lo largo de la dirección de simetría (tal que $\partial_\varphi = 0$); y perpendicular a ella, pero a su vez perpendicular a las superficies de flujo. Por ejemplo, puede demostrarse fácilmente que es válida la relación (Ec. 7.2 en [4]),

$$\mathbf{B} = I(\psi)\nabla\varphi + \nabla\varphi \times \nabla\psi = \mathbf{B}_T + \mathbf{B}_P, \quad (4.6)$$

donde el primer sumando es la componente toroidal (paralela al vector unitario toroidal $R\nabla\varphi$) y el segundo la poloidal. Como vemos, en esta formulación la componente toroidal depende de la corriente poloidal, $|\mathbf{B}_T| = B_T = I/R$, que en la geometría magnética que estamos usando puede ser constante y el campo toroidal varía $\sim 1/R$.

Calculemos explícitamente las componentes del campo. En coordenadas cartesianas, se tiene:

$$\nabla\varphi = \frac{1}{R^2} \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Obsérvese que el ángulo está definido en sentido contrario al habitual en coordenadas cilíndricas, lo que se hace para que la base del sistema de *coordenadas toroidales*, $\{\nabla\psi, \nabla\theta, \nabla\varphi\}$, forme un triedro a derechas² en cada punto

² Aquí no haremos uso explícito del llamado *ángulo poloidal* θ , pero el convenio de signo para definir φ responde a, como se ha dicho, tener el triedro orientado convencionalmente. No siempre se hace así (véase [3], p. 828).

del plasma. Con ello, y calculando el gradiente de ψ dado por la Ec. 4.3, el campo magnético Ec. 4.6 tiene por componentes

$$\mathbf{B}_T = I\nabla\varphi = \frac{I}{R^2} \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{B}_P = \nabla\varphi \times \nabla\psi = \frac{2\psi_0}{R_0^4} \begin{pmatrix} -xz/E^2 \\ -yz/E^2 \\ z^2/E^2 + 2(R^2 - R_0^2) \end{pmatrix}.$$

Particularizando al caso $E = 1/2$, tenemos el campo poloidal

$$\mathbf{B}_P = \frac{8\psi_0}{R_0^4} \begin{pmatrix} -xz \\ -yz \\ z^2 + (R^2 - R_0^2)/2 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Sólo queda adoptar unas constantes R_0 , ψ_0 e I . En el caso de R_0 , y puesto que haremos comparaciones con el trabajo [6], adoptamos ya $R_0 = 2,8$ m considerando que los plasmas tienen una relación de aspecto $A = 3$. En cuanto a ψ_0 e I , nos basaremos en definir el valor de parámetros típicos, como el propio radio mayor R_0 y el factor de seguridad q . Nuevamente, nos compararemos con la Ref. [6] tomando $q = 2$. Puesto que basta con tener valores razonablemente consistentes, vamos a basarnos en las relaciones que se encuentran en el límite de secciones circulares de las superficies de flujo.

Recordemos que el flujo toroidal se define como

$$\phi_{\text{tor}} = \int_{\text{sup.toroidal}} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{volumen}} \mathbf{B} \cdot \nabla\varphi dV.$$

Siguiendo la notación dada en [7] definimos la función de flujo toroidal como $\phi = \phi_{\text{tor}}$, donde no se divide por 2π como hemos hecho con el flujo poloidal. Esta magnitud, en el límite de baja relación de aspecto, permite definir una coordenada radial ρ efectiva equivalente al radio menor de un toro de sección circular (Ec. 5.35 en [7]),

$$\phi = B_{T0}\pi\rho^2, \quad (4.9)$$

donde B_{T0} es un valor representativo del campo magnético toroidal, normalmente el valor en el eje magnético. En nuestro caso

$$B_{T0} = \frac{I}{R_0} \quad (4.10)$$

con I constante.

Definamos también el campo magnético poloidal efectivo asociado a cada superficie magnética (Ec. 5.36 en [7]),

$$B_{P0}(\rho) = \frac{1}{R_0} \frac{\partial \psi}{\partial \rho}, \quad (4.11)$$

que, calculado a partir de la Ec. 4.5, resulta

$$B_{P0}(\rho) = \frac{8\psi_0}{R_0^3} \rho. \quad (4.12)$$

Ahora, el factor de seguridad viene dado por (Ec. 2.50 en [7])

$$q(\rho) = \frac{1}{2\pi} \frac{d\phi}{d\psi}, \quad (4.13)$$

que con las definiciones adoptadas para las funciones de flujo ψ (Ec. 4.5) y ϕ (Ec. 4.9) resulta constante. Mediante la Ec. 4.11 obtenemos

$$B_{P0}(\rho) = \frac{1}{R_0} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial \rho} = \frac{B_{T0}}{qR_0} \rho, \quad (4.14)$$

que coincide con la expresión cilíndrica para el factor de seguridad, $q = (\rho/R_0)(B_{T0}/B_{P0})$.

En suma, hemos obtenido un valor para ψ_0 en función del factor de seguridad y del radio mayor, quedando caracterizados tanto el campo magnético como los flujos. Recordando que particularmente tomaremos $q = 2$, $I = 3$ y $R_0 = 2,8$ m, tenemos:

- A partir de (4.10), $B_{T0} = 1,0714$ T.
- A partir de (4.14), $B_{P0} = 0,1913\rho$ T.
- A partir de (4.12), $\psi_0 = 0,5250$ T/m².

Con esto se tienen todos los parámetros necesarios para caracterizar tanto la coordenada radial ρ y los flujos φ y ψ como \mathbf{B} y sus derivadas. Insistimos en que el objetivo de este apartado es definir una geometría magnética semejante a las que suelen usarse para hacer aproximaciones neoclásicas al transporte en los *tokamak*.

Tokamak II (T-II)

En este caso se va a usar un campo simplificado pero con las mismas propiedades que el extraído de un equilibrio MHD axisimétrico. De hecho,

las ecuaciones que siguen son el caso anterior en el límite de gran relación de aspecto, en el cual $R \approx R_0$; es decir, las que resultan de considerar que la función de flujo poloidal es la Ec. 4.5, $\psi = 4\psi_0\rho^2/R_0^2$. Volviendo a la expresión general Ec. 4.6 y calculando los gradientes con esta función poloidal simplificada, resulta

$$\mathbf{B}_P = 8 \frac{\psi_0}{R_0^2} \begin{pmatrix} zx/R^2 \\ zy/R^2 \\ -(R - R_0)/R \end{pmatrix},$$

cuyo módulo es

$$B_P = \frac{8\psi_0}{R_0^2} \frac{\rho}{R} \quad (4.15)$$

de acuerdo con el campo efectivo Ec. 4.11. Este campo poloidal puede expresarse (Ec. 5.37 en [7]) como

$$\mathbf{B}_P = \hat{u}_\theta \frac{R_0}{R} B_{P0} \quad (4.16)$$

siendo \hat{u}_θ el vector unitario en la dirección poloidal (es decir, dentro de las superficies magnéticas y ortogonal a la coordenada toroidal) y

$$B_{P0}(\rho) = \frac{1}{R_0} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} = 8 \frac{\psi_0}{R_0^3} \rho.$$

El campo toroidal es idéntico al anterior (Ec. 4.7):

$$\mathbf{B}_T = I \nabla \varphi = \frac{I}{R^2} \begin{pmatrix} y \\ -x \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ahora se pueden obtener analíticamente las cantidades

$$B = |\mathbf{B}| = \frac{1}{R} \sqrt{I^2 + K^2((R - R_0)^2 + Z^2)}$$

$$\nabla B = \frac{1}{R^4 B} \begin{pmatrix} x(-I^2 + K^2(R_0 R - R_0^2 - Z^2)) \\ y(-I^2 + K^2(R_0 R - R_0^2 - Z^2)) \\ K^2 Z R^2 \end{pmatrix}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{K(R_0 + R)}{R^3} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$$

donde, para simplificar, sustituimos $K = 8\psi_0/R_0^2$.

En la geometría de T-II tomaremos los mismos parámetros que para el ejemplo T-I: $q = 2$, $I = 3$ y $R_0 = 2,8$ m. Pero recordemos que con T-I hemos obtenido las relaciones entre ψ_0 , q y R usando precisamente la aproximación de gran relación de aspecto, de manera que las ecuaciones son las mismas y ahora obtenemos igualmente $B_{T0} = 1,0714$ T, $B_{P0} = 0,1913\rho$ T y $\psi_0 = 0,5250$ T/m².

4.1.2. Parámetros de las simulaciones

En las simulaciones que siguen se mostrarán los resultados tras alcanzar un estacionario en el que los perfiles promedio de densidad y de temperaturas iónica y electrónica permanecen fijos. Esto se puede considerar desde otro punto de vista pensando que, en el estacionario alcanzado, actúan las fuentes de partículas y energía necesarias para mantener esos perfiles. Los estados estacionarios se obtienen mediante el algoritmo descrito en la Sección 3.4, es decir, utilizando como herramienta la evolución temporal. El campo eléctrico radial se considera nulo por simplicidad.

Se van a estudiar varios casos, todos basados en el mismo perfil de densidad

$$n(\rho) = n_0 e^{-\frac{\rho^2}{1,86}},$$

con $n_0 = 10^{18}$ m⁻³. Se ha tomado una densidad pequeña para obtener colisionales suficientemente bajas. Éstas se consiguen mediante perfiles de temperatura

$$T(\rho) = T_0 e^{-\frac{\rho^2}{0,62}},$$

donde las distintas colisionales se obtendrán utilizando $T_0 = 10, 50, 100, 150$ y 200 eV. Aunque 10 eV es una temperatura demasiado baja para un plasma de las densidades elegidas (por debajo de la energía de ionización), en los estudios de convergencia y comparación aquí realizados esto no es importante. Estos perfiles (normalizados) de densidad y temperatura se representan en la figura 4.2 frente al radio normalizado.

Como parámetros de las especies del plasma se toman los correspondientes a un plasma de hidrógeno puro: la masa iónica, a menos que se indique lo contrario, es la del protón. En los cálculos se respeta la gran diferencia entre esta masa y la electrónica, que se toma según su valor real como se hace con las cargas. Con todas estas elecciones de parámetros y usando los perfiles

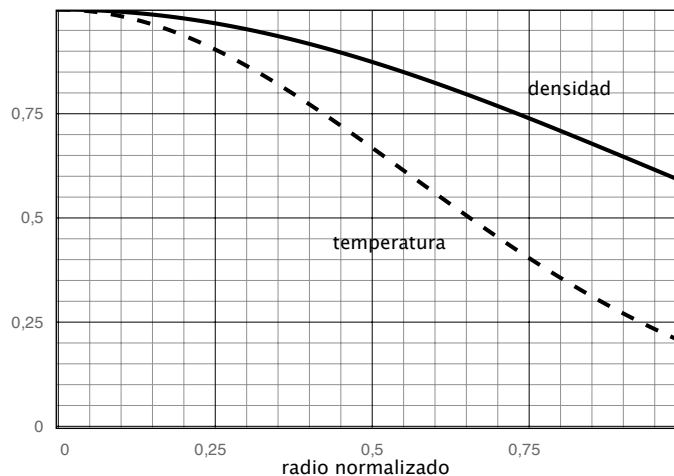


Figura 4.2: Perfiles normalizados de densidad y temperatura utilizados en las simulaciones.

de la figura 4.2, las simulaciones cubren los intervalos de colisionalidad que aparecen en la figura 4.3. La colisionalidad viene expresada como la inversa del tiempo de colisión entre iones, $\nu_{ii} = 1/\tau_{ii}$. La atípica normalización por el factor $0,93/\sqrt{2}v_{thi}$, donde v_{thi} es la velocidad térmica iónica, es necesaria para facilitar la comparación de nuestros resultados con los de la referencia [6], en la que nos basaremos más adelante. Las constantes se deben a las distintas definiciones de la temperatura térmica y a los distintos radios medios utilizados.

4.1.3. Mallas

La axisimetría de las configuraciones magnéticas simplifica notablemente los cálculos al permitir que la resolución espacial en la coordenada toroidal se reduzca a un solo elemento. No obstante, se ha hecho la comprobación básica de verificar que el esquema numérico preserva de hecho la axisimetría cuando se cuenta con un número mayor de elementos en la dimensión toroidal. Los resultados que siguen se basan en cálculos realizados en un cuadrante del toro, el cual se describe mediante un único elemento para cada división radial y poloidal. Habida cuenta de este detalle, para hacer pruebas de convergencia con la malla de cálculo en los “dispositivos” T-I y T-II usaremos

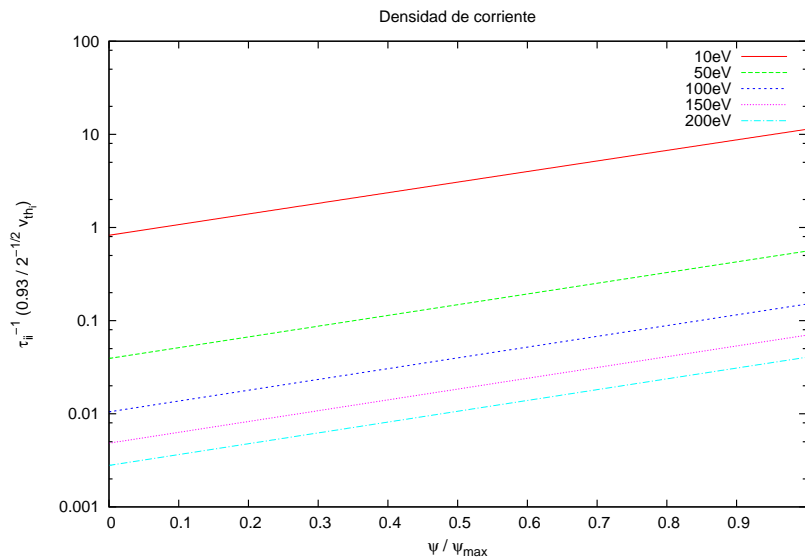


Figura 4.3: Colisionalidades correspondientes a los diferentes perfiles de temperatura estudiados.

los siguientes mallados espaciales. En primer lugar, se estudian tres mallas para la geometría T-II (todas ellas van de $\rho = 0$ a $\rho = 1$ m, ver figura 4.4):

1. La primera (a partir de ahora G1) está compuesta por 6 coronas en la dirección radial y 8 elementos poloidales en cada corona radial.
2. La segunda malla (G2) consta también de 6 coronas en la dirección radial pero 16 elementos poloidales en cada corona radial.
3. La malla G3 consta de 8 coronas y 16 elementos poloidales por corona.

Hemos dispuesto dos mallas adicionales (figura 4.5) que servirán para hacer cálculos a mayor relación de aspecto. Limitando la coordenada ρ máxima a $\rho = 0,7$ m pero con el mismo radio mayor, se tienen casos con relación de aspecto mayor –y, en particular, semejante a los usados en la Ref. [6]–, más apropiados para hacer comparaciones con la teoría. Entonces definimos:

1. Malla G4 con 6 coronas y 8 elementos por corona.
2. Malla G5 con 6 coronas y 16 elementos por corona.

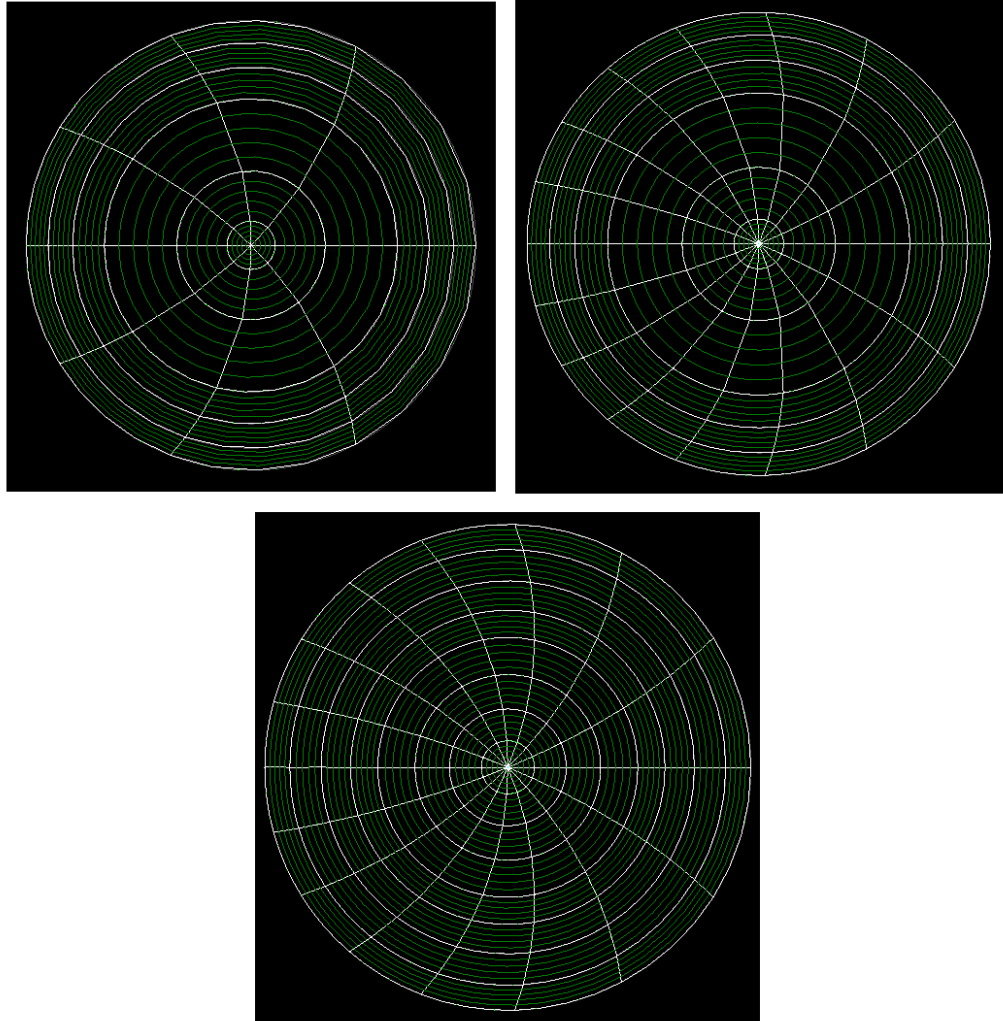


Figura 4.4: De izquierda a derecha y de arriba a abajo, sección de las mallas G1, G2 y G3 (geometría T-II hasta $\rho = 1$ m).

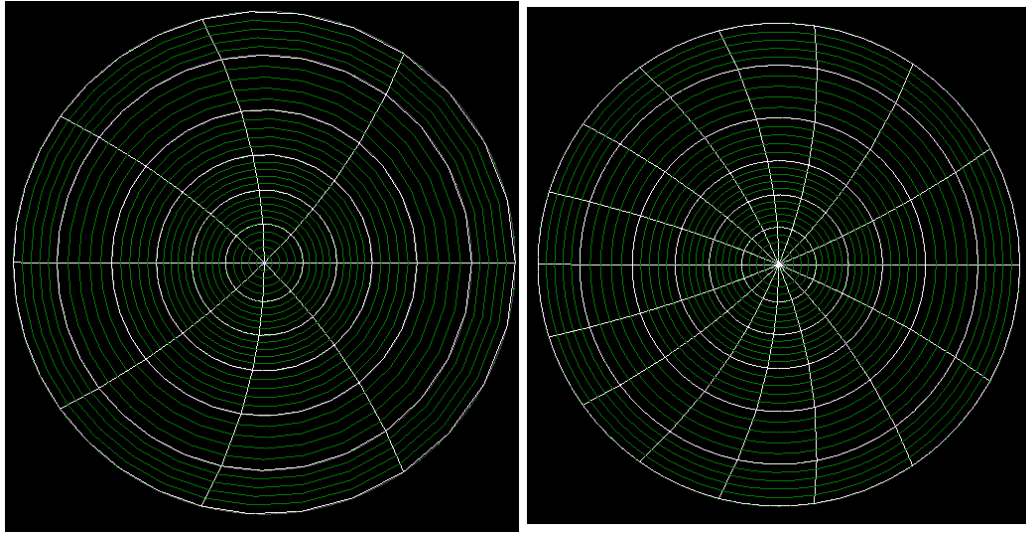


Figura 4.5: Sección de las mallas G4 (izquierda) y G5 (derecha) en la geometría T-II hasta $\rho = 0,7$ m.

Finalmente, para los estudios con el campo más complejo T-I se usará la malla G6 representada en la figura 4.6. Como vemos, la resolución radial es semejante a la de G4 o G5.

4.2. Reducción de las ecuaciones a los supuestos de la teoría

En un capítulo anterior se obtuvieron las ecuaciones dinámicas de las diferentes especies (ver Sec. 2.2) que el código de transporte debe resolver. Pero el propósito aquí es realizar comparaciones con modelos teóricos que funcionan en condiciones más restringidas, motivo por el que hemos desarrollado los campos magnéticos y mallas anteriores. Ahora, además, vamos a linealizar las ecuaciones cinéticas para que el código haga cálculos comparables con las aproximaciones típicas de la teoría.

4.2.1. Ordenamiento de escalas

Un aspecto fundamental en la teoría cinética es la solución al estado de equilibrio en torno a la cual se plantean los desarrollos perturbativos. Recor-

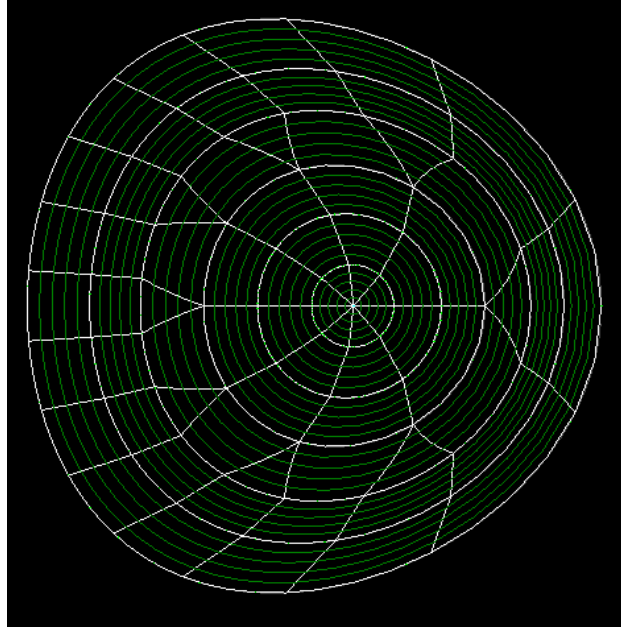


Figura 4.6: Sección de la malla G6 en la geometría T-I. Corresponde a los mismos parámetros de la figura 4.1.

demostramos que suele contemplarse la circunstancia de *campo magnético fuerte*, por la que el radio de Larmor, ρ_L , de las partículas es pequeño frente a las dimensiones macroscópicas del sistema, L_H . Ya hemos aprovechado esto al usar la ecuación cinética de deriva, por lo que estamos en circunstancias en las que $\epsilon = \rho_L/L_H \ll 1$ o, equivalentemente, $\omega_t/\Omega_L \sim \epsilon \ll 1$, donde la *frecuencia de tránsito* es el cociente entre la velocidad térmica y la longitud característica del sistema, $\omega_t = v_t/L_H = \sqrt{2T/m}/L_H$, mientras que $\Omega_L \sim v_t/\rho_L$ es la frecuencia de Larmor. Ahora, considérese una expansión de la función de distribución para la especie a , f_a , en potencias de ϵ ,

$$f_a = \sum_k f_{ka}; f_{ka} = \mathcal{O}(\epsilon^k).$$

Ahora, en lugar de una sola función f_a , se requiere resolver una serie infinita de funciones f_{ka} . Por tanto será necesario un número igualmente extenso de ecuaciones para determinar la solución al conjunto de f_{ka} . Para explicar el proceso y expresar algunas ideas al respecto, se propone trabajar

sobre un ejemplo. Sea una ecuación de evolución para f_a del tipo

$$T_0(f_a) + T_\epsilon(f_a) = 0,$$

donde $T_0(f_a)$ y $T_\epsilon(f_a)$ son operadores lineales que contienen términos de orden cero y ϵ respectivamente. Recuérdese que la ecuación de centro guía utilizada sólo es precisa hasta orden ϵ , por lo que su expresión será muy semejante a la propuesta en este ejemplo para casos en que no evolucionen ni el campo eléctrico ni el magnético, y se tome una versión linealizada del operador de colisión. A partir de la expansión de f_a puede escribirse

$$T_0(f_{0a}) + T_0(f_{1a}) + T_0(f_{2a}) + \dots + T_\epsilon(f_{0a}) + T_\epsilon(f_{1a}) + T_\epsilon(f_{2a}) + \dots = 0.$$

Para obtener solución a todas las funciones f_{ka} , se propone la serie infinita de ecuaciones³

$$\begin{aligned} T_0(f_{0a}) &= 0, \\ T_0(f_{1a}) + T_\epsilon(f_{0a}) &= 0, \\ T_0(f_{2a}) + T_\epsilon(f_{1a}) &= 0, \\ &\dots \end{aligned} \tag{4.17}$$

que pueden ser resueltas en cadena y que, entre todas, cumplen la ecuación de centro guía original. Obsérvese que en cada ecuación los miembros son todos del mismo orden. Por ejemplo, para la segunda ecuación de 4.17 se tienen dos términos:

1. un operador de orden cero sobre f_{1a} (esperada de orden uno), dando como resultado un término de orden uno.
2. un operador de orden uno sobre f_{0a} (esperada de orden cero), dando como resultado un término de orden uno.

Una vez obtenidas las soluciones numéricas, cada f_{ka} debe ser, respectivamente, ϵ^k veces más pequeña que f_{0a} . En tal caso, resolver las N primeras ecuaciones de 4.17 (asociadas a los N primeros ordenes) permite obtener una solución aproximada a f_a cuyo error es de orden ϵ^{N+1} . Lo fundamental para que la afirmación anterior sea correcta es la precisa escisión de la dinámica

³Se necesitan tantas ecuaciones como funciones para obtener un sistema completo.

entre los operadores $T_0(f_a)$ y $T_\epsilon(f_a)$. El problema con la ecuación de evolución de los centro guía es que, bajo determinadas condiciones⁴, los términos de dinámica pueden no ser fácilmente separables en órdenes de ϵ . Esto implica que la serie de ecuaciones 4.17 no presente una separación adecuada de órdenes. El resultado final, es que las funciones f_{ka} no tienen por qué ser ϵ^k veces más pequeñas que f_{0a} . Tal situación se puede resolver mediante los procedimientos:

- buscar una separación clara en órdenes de un nuevo parámetro de pequeñez o, caso de ser posible, llevar a cabo una mejor distribución de la dinámica en órdenes de ϵ .
- Resolver un mayor número de ecuaciones en la serie 4.17. A medida que se resuelven más ecuaciones, se obtendrán términos nuevos en la expansión de f_a . Cuando los términos añadidos sean del orden de ϵ veces f_{0a} se puede decir, por un criterio de convergencia, que el error es de ese orden también. Es decir, se ha encontrado una solución con un error del mismo orden que la ecuación de centro guía (ϵ).
- Usar un método no basado en un ordenamiento de escala, como el presentado en esta tesis.

Por supuesto, en cualquier ordenamiento de escala, la solución es exacta si f_a se forma a partir de los infinitos términos f_{ka} , sea cual sea la forma de escindir la ecuación de evolución.

Hagamos un inciso aquí para evitar confusiones entre la precisión de la expansión y la de la ecuación de centro guía: resolver, por ejemplo, la ecuación de segundo orden en ϵ asociada a f_{2a} no parece congruente con una ecuación cinética de centros guía que solo es exacta en primer orden. No obstante, esto solo es cierto si la solución numérica a f_{2a} efectivamente toma valores ϵ^2 más pequeños que f_{0a} . Como se ha explicado más arriba, esto no es cierto cuando la separación de la dinámica en órdenes de ϵ no sea adecuada. Una mala elección en la separación no quiere decir que la solución obtenida sea errónea, simplemente que habrá que resolver más términos que el cero y el uno para una solución suficientemente aproximada.

Por tanto, es importante percibir que aunque puedan hacer falta términos en la expansión de f_a de orden dos o incluso superiores, no necesariamente

⁴Máquinas complejas tales como TJJ-II o regímenes donde las partículas muestran grandes excursiones radiales en sus trayectorias [8].

es incongruente con la ecuación de centro guía. A veces, la separación de la dinámica en órdenes de ϵ no es adecuada y son necesarios más términos que los dos primeros en la serie de $f_a = \sum_k f_{ka}$ para alcanzar una solución precisa hasta orden ϵ , al igual que la ecuación de centro guía.

En los ejemplos de este capítulo (*tokamak* axisimétrico con gran relación de aspecto), se toman regímenes de trabajo donde es posible una buena separación de los términos de la ecuación de evolución en órdenes de ϵ . Entonces, para obtener flujos correctos hasta orden ϵ (el mismo que la precisión de la ecuación de centro guía) es necesario resolver sólo f_{0a} y f_{1a} . Además, los flujos dependerán sólo de f_{1a} , puesto que los correspondientes a f_{0a} son nulos: esto es debido a que f_{0a} , en los casos a estudiar, toma la forma de funciones maxwellianas homogéneas (esto se obtendrá en 4.2.5).

4.2.2. Ecuación de centro guía

En el capítulo 2 se desarrolló la ecuación cinética pensando en plasmas de *stellarator*, donde la corriente del plasma, no siendo obligatoria para que la geometría magnética sea confinadora, es poco importante. El campo magnético de vacío cumple $\nabla \times \mathbf{B} = 0$ en la zona de confinamiento y en esas circunstancias se pueden agrupar (ver, p.ej., [9]) las derivas por curvatura,

$$\mathbf{v}_\kappa = \frac{v_\parallel^2}{\Omega_L} \mathbf{b} \times (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b})$$

y por gradiente de B ,

$$\mathbf{v}_{\text{grad}B} = \frac{v_\perp^2}{2\Omega_L} \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^2}$$

en el término que nosotros hemos llamado $\mathbf{v}_{\nabla B}$ en la Ec. 2.20. Por otro lado, las comparaciones con la teoría neoclásica se van a basar en la geometría y los plasmas de *tokamak*, en los que la corriente paralela al campo magnético da lugar a la correspondiente deriva. Según esto, deberíamos incluir la contribución a las derivas dada por $\nabla \times \mathbf{B} \neq 0$. Puesto que $\nabla \times \mathbf{b} = (\nabla \times \mathbf{B} + \mathbf{b} \times \nabla B)/B$, obtenemos la contribución de la corriente a la deriva por curvatura⁵,

$$\frac{mv_\parallel^2}{eB} \mathbf{b} \times (\mathbf{b} \cdot \nabla \mathbf{b}) = \frac{mv_\parallel^2}{eB^2} (\nabla \times \mathbf{B})_\perp + \frac{mv_\parallel^2}{e} \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3}.$$

⁵ Usando la identidad vectorial $\mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) = (\nabla \mathbf{B}) \cdot \mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \nabla) \mathbf{B}$, se demuestra fácilmente la relación $(\nabla \times \hat{\mathbf{b}})_\perp = \hat{\mathbf{b}} \times (\hat{\mathbf{b}} \cdot \nabla \hat{\mathbf{b}})$. Véase también la Ec. 3.79 en [7].

Más sutil es la contribución de la componente paralela de la corriente. En las Ec. 3.16 y 3.17 de la Ref. [7] aparecen los términos

$$\mathbf{v}_J = \frac{v_{\perp}^2}{2\Omega_L}(\nabla \times \mathbf{B})_{\parallel} + \frac{v_{\parallel}^2}{\Omega_L B}(\nabla \times \mathbf{B})_{\perp} = \mathbf{v}_{J\parallel} + \mathbf{v}_{J\perp}, \quad (4.18)$$

igual que en la Ec. 12 de la Ref. [6] con cuyos cálculos haremos comparaciones más adelante. El término $\mathbf{v}_{J\perp}$ procede de la deriva por curvatura y de momento lo añadiremos directamente a nuestras derivas. Éste aparece naturalmente al obtener la ecuación cinética mediante transformación a las coordenadas de centro guía. Al respecto, es importante tener en cuenta que en la Ref. [6] se utiliza una descripción de ecuación cinética (basada en la Ref. [7]) diferente a la considerada en este trabajo, pues procede de un proceso distinto de promediado al giro de Larmor. A la vista, una diferencia inmediata es que aquí consideramos μ constante mientras que en la Ref. [6] esta magnitud tiene evolución temporal. Como puede comprobarse en [10] (ver Tabla 8.1 y comentarios relacionados), nuestras variables *de centro guía*, v_{\parallel} y v_{\perp} , son consecuencia de una transformación de coordenadas que las hace un poco distintas (por un término de orden ϵ) de las correspondientes componentes de la velocidad *de las partículas*. Por lo tanto, es importante tener presente que nuestro momento magnético, que sí se conserva en orden ϵ , *no es* el momento magnético tal como se obtendría usando la verdadera componente perpendicular de la velocidad de las partículas, el cual sólo se conserva en ausencia de campo eléctrico y si el campo magnético es homogéneo. Esta sutil diferencia entre el significado de las coordenadas de centro guía –obtenidas mediante una transformación adecuada de las coordenadas del espacio de fase– y las obtenidas mediante promedios de las velocidades microscópicas, da lugar a diferentes formulaciones que requieren análisis e interpretaciones algo distintas, como se discute en la Ref. [11]. Otra consecuencia de las diferentes maneras de obtener la ecuación cinética es la presencia o no del término que nos ocupa: la contribución de la deriva paralela. En nuestra descripción, dicho término *no aparece explícitamente* por muy grande que sea la corriente, lo que se debe a la propia definición de v_{\parallel} . En efecto, la expresión de $\mathbf{v}_{J\parallel}$ en la Ec. 4.18 es incongruente con nuestra ecuación cinética y no debe aparecer. De todas formas es fácil comprobar que, si el cociente entre las presiones termodinámica y magnética es pequeño, $\beta_{\text{plasma}} \sim \epsilon$, y la corriente paralela es del orden de la corriente perpendicular, $J_{\parallel} \sim J_{\perp}$, la deriva para-

lela en la descripción de Hinton y Hazeltine resulta ser de segundo orden⁶: $v_{J\parallel} \sim (\omega_t/\Omega_L)L_H v_t \mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b} = (\omega_t/\Omega_L)\epsilon v_t = \epsilon^2 v_t$. Lo mismo se puede decir de $v_{J\perp}$.

Por tanto $v_{J\parallel}$ no debe aparecer, por definición. Sin embargo, $v_{J\perp}$ se mantendrá de forma explícita, a pesar de ser un término de segundo orden⁷ bajo el criterio de baja β . Dicho criterio se aplicará sólo al final del proceso, por generalidad. Así, la ecuación cinética 2.14, una vez incluida la nueva deriva $v_{J\perp}$, puede expresarse como

$$\partial_t f + (\mathbf{v}_D + v_{\parallel} \mathbf{b} + \mathbf{v}_{J\perp}) \cdot \nabla f + (\dot{\beta}_{\parallel} + \dot{\beta}_D + \dot{\beta}_{E\parallel} + \dot{\beta}_J) \partial_{\beta} f + (\dot{\lambda}_{\parallel} + \dot{\lambda}_D + \dot{\lambda}_{E\parallel} + \dot{\lambda}_J) \partial_{\lambda} f = \sum_b \mathcal{C}_{ab} \quad (4.19)$$

donde ahora se incluyen los términos de deriva adicionales en la convección

$$\mathbf{v}_d = \mathbf{v}_E + \mathbf{v}_{\nabla B} + v_{\parallel} \mathbf{b} + \mathbf{v}_{J\perp} = \mathbf{v}_D + v_{\parallel} \mathbf{b} + \mathbf{v}_{J\perp}.$$

En cuanto a los términos de aceleraciones, se va a separar la dinámica del centro guía en componentes asociadas al transporte paralelo (\parallel), a las derivas descritas en el capítulo 2 (D), a la deriva por la corriente (J), y al campo eléctrico paralelo (E_{\parallel}). Para ello definimos:

$$\begin{aligned} \dot{\beta}_{\parallel} &= 0 \\ \dot{\beta}_D &= \frac{q}{T_0} (\mathbf{v}_E + \mathbf{v}_{\nabla B}) \cdot \mathbf{E} = \frac{q}{T_0} \mathbf{v}_{\nabla B} \cdot \mathbf{E} \\ \dot{\beta}_J &= \frac{q}{T_0} \mathbf{v}_{J\perp} \cdot \mathbf{E} \\ \dot{\beta}_{E\parallel} &= \frac{q}{T_0} v_{\parallel} E_{\parallel} \\ \dot{\lambda}_{\parallel} &= -\frac{1-\lambda^2}{2\lambda} v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla \ln B \\ \dot{\lambda}_D &= \frac{1-\lambda^2}{2\lambda} \left(-\mathbf{v}_E \cdot \nabla \ln B + \frac{q}{\beta T_0} \mathbf{v}_{\nabla B} \cdot \mathbf{E} \right) \\ \dot{\lambda}_J &= \frac{1-\lambda^2}{2\lambda} \left(-\mathbf{v}_{J\perp} \cdot \nabla \ln B + \frac{q}{\beta T_0} \mathbf{v}_{J\perp} \cdot \mathbf{E} \right) \\ \dot{\lambda}_{E\parallel} &= (1-\lambda^2) \frac{q}{m v_t \beta^{1/2}} E_{\parallel}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

⁶ Tenemos $\mathbf{b} \cdot \nabla \times \mathbf{b} = B^{-2} \mathbf{B} \cdot \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{B} \cdot \mathbf{J} / B^2 \sim \mu_0 \nabla p / B^2 \sim \beta_{\text{plasma}} / L_H \sim \epsilon$.

⁷La dinámica de la ecuación de centro guía es sólo válida hasta primer orden en ϵ , por lo que no tiene sentido mantener una corrección de segundo orden.

4.2.3. Campo eléctrico

Por último, se llevará a cabo una expansión del potencial electrostático con los mismos criterios que la de f_a :

$$\phi = \sum_{k=0} \phi_k, \quad (4.21)$$

siendo $\phi_k \sim \epsilon^k$ y $\phi_0 \sim T/q$. Hay que tener en cuenta que el campo eléctrico puede venir a través del potencial electrostático, o por la inducción de corrientes desde fuera del plasma, por lo que el campo eléctrico completo vendrá dado por:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi + \mathbf{E}_{\text{inducido}}$$

El efecto físico del campo inducido consiste en añadir una corriente eléctrica paralela y una compresión radial asociados a las componentes paralela y perpendicular de $\mathbf{E}_{\text{inducido}}$ respectivamente.

En la física de plasmas para fusión por confinamiento magnético no puede haber una contribución de orden cero al campo paralelo ($E_{\parallel 0} = 0$). Esto se traduce en que ϕ_0 es constante en las superficies magnéticas. Para entender el motivo de esta última afirmación, es necesario hacer un inciso sobre la importancia de E_{\parallel} . En la Ref. [7] (ver ahí la Ec. 5.10) se aduce que en condiciones del plasma lejos de producir una corriente masiva de electrones fugitivos, dicho campo es $E_{\parallel} \sim mv_t/(q\tau_e)\sqrt{m_e/m_i}$, donde τ_e es el tiempo característico de las colisiones electrónicas; de manera que en las expresiones anteriores tenemos, para los electrones,

$$\frac{2q}{mv_t} E_{\parallel} \sim \frac{\epsilon}{\tau_e}; \quad (4.22)$$

y un término considerablemente menor para los iones. Es decir, $E_{\parallel 0}$ debe ser nulo. Esto se refiere tanto al campo inducido como al procedente del potencial electrostático. En el caso electrostático implica que $\phi_0 = \phi_0(\rho)$.

A partir de ahora vamos a eliminar el campo eléctrico inducido de las ecuaciones, tanto por simplicidad como por hacer un análisis semejante al de la Ref. [6]. Tenerlo en cuenta no haría más que añadir un término adicional que no tiene relevancia en lo que sigue.

4.2.4. Estimación del orden de los términos

Para cada especie, electrones o iones, podemos evaluar la importancia relativa entre sumandos de la Ec. 4.19 según ϵ . Por ejemplo, la deriva $|\mathbf{v}_{\nabla B}| \sim$

$(m/2q)(v_t^2/BL_H) \sim v_t^2/L_H\Omega_L \sim \epsilon v_t$. En cuanto a la deriva eléctrica, en el orden inferior, $|\mathbf{v}_E| \sim E/B \sim \phi_0/L_H B \sim T/eBL_H \sim \omega_t v_t/\Omega_L \sim \epsilon v_t$, como la deriva $\mathbf{v}_{\nabla B}$. Sin embargo, el movimiento paralelo es $v_{\parallel} \sim v_t$, de manera que se trata de un término que domina a las derivas.

En cuanto a las aceleraciones (Ecs. 4.20), $\dot{\beta}_{E\parallel}$ y $\dot{\beta}_D$ son de orden ϵ admitiendo un campo de orden cero $-\nabla\phi_0$. Se ha visto que tanto $v_{J\parallel} \sim \epsilon^2$ como $v_{J\perp} \sim \epsilon^2$, de donde $\dot{\beta}_J$ es de orden ϵ^2 . Algo parecido sucede con los términos de variación de λ : resulta un término de orden cero $\dot{\lambda}_{\parallel} \sim v_t/L_H = \omega_t$, mientras que $\dot{\lambda}_D$ y $\dot{\lambda}_{E\parallel}$ son de orden ϵ y $\dot{\lambda}_J$ es $\sim \epsilon^2$.

4.2.5. Ecuación de evolución en orden cero

Como primer paso vamos a extraer “la parte de orden cero” en nuestra formulación de la ecuación cinética para comprobar que se obtiene ciertamente la ecuación cuya solución estacionaria es una maxwelliana.

Tomando de la ecuación cinética 4.19 sólo los términos en orden cero para la especie a (teniendo en cuenta que $E_{\parallel 0} = 0$), se debe cumplir:

$$\partial_t f_{0a} + v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla f_{0a} - \frac{1 - \lambda^2}{2} \beta^{1/2} v_{ta} \mathbf{b} \cdot \nabla \ln B \partial_{\lambda} f_{0a} = \sum_b \mathcal{C}(f_{0a}, f_{0b}). \quad (4.23)$$

Hemos aprovechado la bilinealidad del operador de colisión considerando términos de orden cero los que contienen funciones f_{0a} y f_{0b} . El sumatorio en b se refiere a todas las especies presentes, incluida la a . Aquí sólo trabajaremos con electrones y una especie iónica.

La solución estacionaria para la Ec. 4.23 es una maxwelliana. Esto se reconoce mejor expresando la ecuación en función de la energía cinética, $\mathcal{E} = (1/2)mv^2 = (1/2)mv_t^2\beta$, lo que haremos tomando \mathcal{E}, μ como variables dinámicas en vez de β, λ . Para simplificar la notación, sea $T_{0a} \doteq mv_{ta}^2/2$. Entonces $\mathcal{E} = T_{0a}\beta$, $\mu = T_{0a}\beta(1 - \lambda^2)/B$, de donde se obtienen las derivadas

$$\begin{aligned} \frac{\partial \beta}{\partial \mathcal{E}} &= T_0, & \frac{\partial \beta}{\partial \mu} &= \frac{T_0}{B}(1 - \lambda^2) \\ \frac{\partial \lambda}{\partial \mathcal{E}} &= 0, & \frac{\partial \lambda}{\partial \mu} &= -2\lambda\beta\frac{T_0}{B}. \end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned} \partial_{\beta} &= T_0\partial_{\mathcal{E}} + (1 - \lambda^2)\frac{T_0}{B}\partial_{\mu} \\ \partial_{\lambda} &= -2\lambda\beta\frac{T_0}{B}\partial_{\mu}. \end{aligned}$$

Es importante tener presente que μ es función de las coordenadas espaciales a través del campo magnético, de manera que aunque usemos las mismas coordenadas espaciales $\mathbf{x}' = \mathbf{x}$, el gradiente en las nuevas coordenadas debe transformarse así:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}'}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}'} + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mathcal{E}} + \frac{\partial \mu}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mu} = \nabla' + \nabla' \mu \frac{\partial}{\partial \mu}.$$

Para no complicar la notación, y dado que no se cambian las coordenadas espaciales, suprimiremos la prima en el gradiente.

Teniendo lo anterior en cuenta, basta con sustituir en la Ec. 4.23 para comprobar que, tras varias cancelaciones, se obtiene

$$v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla f_{0a} = \sum_b \mathcal{C}(f_{0a}, f_{0b}), \quad (4.24)$$

expresión que podemos encontrar comúnmente en la literatura y cuya bien conocida solución, tras promediar y aplicar el teorema H, es una maxwelliana⁸ (luego depende de β pero no de λ). Por supuesto, esto es cierto siempre y cuando se pueda hablar de acoplo colisional débil entre las especies. En las Refs. [10] (véase su §6.1) y [12] (§10.5) se recuerda que el plasma debe poderse considerar quiescente en las escalas de tiempo de la Ec. 4.24 para poder asegurar que $\sum_b \mathcal{C}(f_{0a}, f_{0b}) = 0$ con $b \neq a$. En general, la Ec. 4.24 se presenta equivalentemente con el operador de colisión en la forma $\mathcal{C}(f_{0a}, f_{0a})$, es decir, considerando o bien que el plasma es isoterma o que el acoplo colisional entre las distintas especies es lo bastante débil. En cualquier caso, la función solución –la maxwelliana– pertenece al núcleo del operador de colisión, por tanto 4.24 se traduce en

$$\nabla_{\parallel} f_{0a} = 0, \quad (4.25)$$

donde $\nabla_{\parallel} = \mathbf{b} \cdot \nabla$; es decir, f_{0a} es constante a lo largo de las líneas de campo magnético, o lo que es lo mismo, depende de los parámetros *locales* en cada superficie de flujo. Así, $f_{0a} = f_{0a}(n_{0a}, T_{0a})$, donde $n_{0a} = n_{0a}(\rho)$ y $T_{0a} = T_{0a}(\rho)$ y la única dependencia espacial de f_{0a} es la coordenada radial que etiqueta las superficies de flujo (Sec. 4.1): $f_{0a}(\mathbf{x}, \beta) = f_{0a}(\rho, \beta)$. Ahora podemos volver a la Ec. 4.23 y reescribirla sabiendo que $\partial_{\lambda} f_{0a} = 0$ obteniendo, de nuevo, la Ec. 4.25.

⁸El desarrollo de la FdD mediante polinomios ortogonales modulando una maxwelliana explota precisamente el que esta función represente un buen estado estacionario de referencia.

En resumen, las expansiones de la FdD para cualquier especie del plasma pueden expresarse como

$$f_a(\rho, \theta, \phi, \beta, \lambda, t) = f_{0a}(\rho, \beta) + f_{1a}(\rho, \theta, \phi, \beta, \lambda, t) + \dots, \quad (4.26)$$

donde, como ya se ha comentado, f_1 es una función de orden ϵ y donde los puntos suspensivos se refieren a los órdenes superiores.

4.2.6. Ecuación de evolución en primer orden

La ecuación de orden uno se construye, de modo semejante a la de orden cero, a partir de los términos de primer orden en 4.19. Así la ecuación de evolución para f_{1a} , teniendo en cuenta la aproximación de baja β , debe cumplir:

$$\begin{aligned} & \partial_t f_{1a} + v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla f_{1a} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} + (\dot{\beta}_D + \dot{\beta}_{E\parallel}) \partial_{\beta} f_{0a} \\ & + (\dot{\lambda}_D + \dot{\lambda}_{E\parallel}) \partial_{\lambda} f_{0a} + \dot{\lambda}_{\parallel} \partial_{\lambda} f_{1a} = \sum_b [\mathcal{C}(f_{1a}, f_{0b}) + \mathcal{C}(f_{0a}, f_{1b})]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Observando que $f_{0a} \propto e^{-\beta}$, tenemos $\partial_{\beta} f_{0a} = -f_{0a}$; además $\partial_{\lambda} f_{0a} = 0$, de manera que la función f_{1a} estacionaria debe cumplir

$$\begin{aligned} & v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla f_{1a} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} - (\dot{\beta}_D + \dot{\beta}_{E\parallel}) f_{0a} + \dot{\lambda}_{\parallel} \partial_{\lambda} f_{1a} \\ & = \sum_b (\mathcal{C}(f_{1a}, f_{0b}) + \mathcal{C}(f_{0a}, f_{1b})). \end{aligned} \quad (4.28)$$

De nuevo, podemos relacionar esta expresión con la comúnmente usada en la literatura sin más que volver a aplicar el cambio a las coordenadas \mathcal{E} y μ del espacio de velocidades. Para esto es útil recordar que $v_{\perp}^2 = v_t^2 \beta (1 - \lambda^2)$ y que $\nabla \mu = -\mu \nabla \ln B$. Entonces resulta la expresión

$$\begin{aligned} & v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla f_{1a} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} + T_{0a} (\dot{\beta}_D + \dot{\beta}_{E\parallel}) \partial_{\mathcal{E}} f_{0a} \\ & = \sum_b (\mathcal{C}(f_{1a}, f_{0b}) + \mathcal{C}(f_{0a}, f_{1b})), \end{aligned}$$

que, sustituyendo $E_{\parallel} = -\mathbf{b} \cdot \nabla \phi_1$ y las definiciones Ec. 4.20, queda

$$v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla f_{1a} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} - q(\mathbf{v}_D \cdot \nabla \phi_0 + v_{\parallel} \nabla \phi_1) \frac{\partial f_{0a}}{\partial \mathcal{E}}$$

$$= \sum_b (\mathcal{C}(f_{1a}, f_{0b}) + \mathcal{C}(f_{0a}, f_{1b})). \quad (4.29)$$

De la expansión del potencial electrostático 4.21, en la ecuación de primer orden sólo aparecerán $\phi_0(\rho)$ y $\phi_1(\rho, \theta, \varphi)$. Por un lado, la componente $\phi_0(\rho)$ origina el campo eléctrico radial promedio, homogéneo en las superficies de flujo, mientras que $\phi_1(\rho, \theta, \varphi)$ será responsable de mantener la ambipolaridad local en cada superficie. Este último no suele considerarse en los estudios teóricos [13], motivo por el que vamos a preparar nuestras ecuaciones agrupando dentro de una nueva función g_{1a} el potencial y la FdD de orden cero como también se hace en la Ref. [6],

$$g_{1a} = f_{1a} - f_{0a} \frac{q_a}{T_{0a}} \phi_1,$$

donde conviene recordar que $f_{0a} = f_{0a}(\rho)$, $T_{0a} = T_{0a}(\rho)$. Sustituyendo directamente en la Ec. 4.28 y dado que $\mathbf{b} \cdot \nabla f_0 = 0$, $\mathbf{b} \cdot \nabla T_0 = 0$, se obtiene

$$\begin{aligned} v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla g_{1a} + \frac{q}{T_{0a}} f_{0a} v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla \phi_1 + \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} - (\dot{\beta}_D + \dot{\beta}_{E\parallel}) f_{0a} + \dot{\lambda}_{\parallel} \partial_{\lambda} g_{1a} \\ = \sum_b (\mathcal{C}(f_{1a}, f_{0b}) + \mathcal{C}(f_{0a}, f_{1b})), \end{aligned}$$

expresión que se simplifica un poco al considerar la definición de $\dot{\beta}_{E\parallel}$ (Ec. 4.20):

$$v_{\parallel} \mathbf{b} \cdot \nabla g_{1a} + \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} - \dot{\beta}_D f_{0a} + \dot{\lambda}_{\parallel} \partial_{\lambda} g_{1a} = \sum_b \mathcal{C}(g_{1a}, f_{0b}) + \sum_b \mathcal{C}(f_{0a}, g_{1b}). \quad (4.30)$$

Aquí hemos considerado, como en la Ref. [13], que $\mathcal{C}(qf_{0a}/T, f_{0b}) \approx 0$.

Para obtener la solución a la Ec. 4.30, en el código haremos evolucionar hasta el estado estacionario las ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{1a}}{\partial t} + v_t \lambda \beta^{1/2} \mathbf{b} \cdot \nabla g_{1a} + \dot{\lambda}_{\parallel} \frac{\partial f_{1a}}{\partial \lambda} - \sum_b \mathcal{C}(g_{1a}, f_{0b}) - \sum_b \mathcal{C}(f_{0a}, g_{1b}) = \\ - \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} + \dot{\beta}_D f_{0a} \end{aligned} \quad (4.31)$$

para electrones e iones. Hemos expresado así la ecuación para hacer explícito el que se trata de un cálculo *local*, entendiendo por esto que las g_{1a} dependen estrictamente de los valores del plasma establecidos en la correspondiente

superficie de flujo: en el miembro derecho de la Ec. 4.31 aparece un término que puede considerarse “fuente” en la evolución de g_{1a} , pero la solución que se obtenga no alterará en absoluto el valor de g_{1a} en otra posición radial (nótese que $\mathbf{b} \cdot \nabla g_{1a} = \nabla_{\parallel} g_{1a}$).

Una vez obtenidas las soluciones estacionarias g_{1e} y g_{1i} , es fácil obtener ϕ_1 y las f_{1a} a partir de la condición de ambipolaridad

$$\sum_a q_a n_{0a} = 0,$$

que equivale a

$$\sum_a \frac{q_a^2 n_{0a}}{T_{0a}} \phi_1 = \sum_a q_a \int g_{1a} d^3v.$$

4.2.7. Órdenes superiores

El proceso se podría continuar indefinidamente para las ecuaciones de orden superior, pero no se requiere en los casos presentados en este capítulo. En el apéndice A se dan más detalles del tratamiento de la ecuación de evolución, desde un punto de vista más explícito y cercano a las ecuaciones implementadas en el código. De hecho, en caso de ser necesario, el código puede ofrecer la precisión equivalente a incluir todos los órdenes superiores, sin tener que añadir ecuaciones sucesivas, porque está preparado para hacer evolucionar la ecuación cinética completa.

4.2.8. Flujos de partículas y calor

Hemos visto que, en el orden inferior en una expansión tomando ϵ como parámetro de pequeñez, la densidad, la temperatura y el potencial electrostático son funciones de la superficie de flujo. Puede decirse que el campo magnético actúa de lazo conductor por las superficies y homogeneiza las propiedades del plasma sobre ellas. No obstante, hay derivas y comportamientos que obligan a las partículas a salirse de las superficies magnéticas e interesa cuantificar el transporte radial correspondiente, lo que se hace en términos de promedios a la superficie de flujo.

Si ψ es una coordenada general para las superficies magnéticas, se define el promedio de la cantidad $G(\psi, \theta, \varphi)$ a la correspondiente superficie como

$$\bar{G}(\psi) = \langle G(\psi, \theta, \varphi) \rangle = \frac{\int_{\Delta V} G(\psi, \theta, \varphi) dV}{\int_{\Delta V} dV}, \quad (4.32)$$

donde el recinto de integración ΔV es una corona de volumen diferencial que abarca la superficie magnética sobre la que se desea promediar. Una propiedad interesante y muy utilizada [7] del operador de promedio es que aniquila, para toda $G(\mathbf{x})$ continua en el espacio, el operador $\mathbf{B} \cdot \nabla$ de derivación a lo largo de la dirección del campo,

$$\langle \mathbf{B} \cdot \nabla G(\mathbf{x}) \rangle = 0;$$

es decir, el promedio a una superficie magnética de las variaciones de G a lo largo del campo magnético es nulo. Es para preservar esta propiedad que se define así el promedio a la superficie de flujo y no, por ejemplo, en la manera más inmediata

$$\frac{\int_S G(\psi, \theta, \varphi) dS}{\int_S dS}.$$

donde S representa la superficie magnética sobre la que se promedia. Como es lógico, las integrales en coronas diferenciales que aparecen en la Ec. 4.32 no son equivalentes en el límite a la integral sobre la superficie magnética, pues la corona siempre posee información de su anchura relativa, aún en el límite diferencial, a través del jacobiano J . Se puede decir que el operador de promedio es una integral de superficie pesada por el grosor local de la corona.

A partir de los flujos tridimensionales de partículas y calor (Ecs. 1.1)

$$\mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3v, \quad \mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) = \int \frac{mv^2}{2} \mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d^3v, \quad (4.33)$$

y recordando además que los elementos de superficie y de volumen pueden, respectivamente, expresarse como $dV = J d\psi d\theta d\phi$ y $d\mathbf{S} = J \nabla \psi d\theta d\phi$, se comprueba que en el límite $\Delta V \rightarrow 0$

$$\langle \mathbf{\Gamma} \cdot \nabla \psi \rangle = \frac{1}{dV/d\psi} \int \mathbf{\Gamma} \cdot \frac{\nabla \psi}{|\nabla \psi|} dS = \frac{1}{V'} \int \mathbf{\Gamma} \cdot d\mathbf{S}. \quad (4.34)$$

Para calcular los flujos radiales (Ecs. 1.2)

$$\Gamma(\psi, t) = \frac{\int_S \mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S}}{\int_S dS}, \quad Q(\psi, t) = \frac{\int_S \mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{S}}{\int_S dS},$$

promediaremos la cantidad $\mathbf{\Gamma} \cdot \nabla \psi / |\nabla \psi|$. Obsérvese que en geometría cilíndrica las dos definiciones de promedio coinciden, $\langle \mathbf{\Gamma} \cdot \nabla r \rangle = (1/S) \int \mathbf{\Gamma} \cdot d\mathbf{S}$. Usaremos la fórmula Ec. 4.34 para obtener los flujos promedio usando $\psi = \rho$ (ver

Sec. 4.1.1) como coordenada radial. Así, para las partículas tenemos

$$\Gamma(\psi, t) = \langle \mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \rho \rangle = \frac{1}{\psi'} \langle \mathbf{\Gamma}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \psi \rangle; \quad (4.35)$$

y en el caso del calor,

$$Q(\psi, t) = \langle \mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \rho \rangle = \frac{1}{\psi'} \langle \mathbf{Q}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \psi \rangle. \quad (4.36)$$

donde $\psi' = \partial\psi/\partial\rho$.

Sustituyendo las Ecs. 4.33, tendríamos las expresiones exactas para los flujos en la precisión de la ecuación cinética de centro guía. No obstante, estamos interesados en comparar los resultados del código con las expresiones para los flujos al más bajo orden en la teoría (ϵ^2), de manera que usaremos las velocidades hasta orden ϵ , esto es,

$$\Gamma_a = \frac{1}{\psi'} \left\langle \int f_a(\mathbf{v}_D \cdot \nabla \psi) d^3v \right\rangle$$

$$Q_a = \frac{1}{\psi'} \left\langle \int \frac{mv^2}{2} f_a(\mathbf{v}_D \cdot \nabla \psi) d^3v \right\rangle,$$

donde $\mathbf{v}_D = \mathbf{v}_E + \mathbf{v}_{\nabla B}$ (ver 4.2.2).

Estos flujos tienen en cuenta la variación del potencial electrostático dentro de las superficies magnéticas [6, 13]. Sin embargo, en la teoría convencional [7] es común despreciar dicho potencial. Observando las Ecs. 4.30 y 4.31 se puede llegar a la conclusión de que ignorar el potencial es equivalente a tomar como función de distribución resultante g_{1a} en lugar de f_{1a} . En los trabajos [13, 14] se demuestra que, en tal caso, los flujos de partículas son idénticos pero no ocurre lo mismo con los de calor, pues aunque el flujo de calor iónico es del mismo orden, el electrónico se demuestra que es $\sqrt{m_i/m_e}$ mayor teniendo en cuenta el potencial electrostático. Por esto se definen unos flujos de calor modificados [13] usando g_a en vez de f_a , cuyos valores coinciden con los obtenidos por la teoría neoclásica convencional, la cual desprecia las perturbaciones del potencial electrostático dentro de una misma superficie magnética. En definitiva, los flujos de las simulaciones que calcularemos para

hacer comparaciones con los resultados teóricos son las versiones modificadas

$$\Gamma_a^{\text{NC}} = \frac{1}{\psi'} \left\langle \int g_{1a} (\mathbf{v}_D \cdot \nabla \psi) d^3v \right\rangle \quad (4.37)$$

$$Q_a^{\text{NC}} = \frac{1}{\psi'} \left\langle \int \frac{m_a v^2}{2} g_{1a} (\mathbf{v}_D \cdot \nabla \psi) d^3v \right\rangle, \quad (4.38)$$

de acuerdo con los estimados en la teoría neoclásica, como se señala en la Ref. [13].

4.3. Estudios de convergencia

4.3.1. Convergencia espacial

Como primera comprobación, se va a estudiar la convergencia de flujos y corrientes del plasma a medida que se incrementa el número de elementos de malla o el orden de los polinomios que interpolan espacialmente las magnitudes. Aunque veremos que a medida que los flujos convergen también se van acercando a la condición de ambipolaridad, $\Gamma_i^{\text{NC}} = \Gamma_e^{\text{NC}}$, la importante cuestión del flujo ambipolar se tratará mas adelante.

En cada gráfica de la figura 4.7 mostramos los perfiles radiales de Γ_i^{NC} y Γ_e^{NC} en función de la coordenada radial normalizada obtenidos usando grados 2 y 3 para la interpolación espacial. La misma información se repite usando las mallas G1 (arriba), G2 (centro) y G3 (abajo) y dos temperaturas (100 eV, izda.; 150 eV, dcha.). La observación clave es que la convergencia aumenta a medida que crece el número de elementos de malla o el orden polinómico de interpolación, pero es el orden polinómico el elemento más significativo. El paso de $N = 2$ a $N = 3$ tiene un efecto drástico en la mejora de la convergencia (y la ambipolaridad), lo que se hace más notable a mayor temperatura. Se tomará orden 3 como compromiso entre cantidad de cálculo y precisión. Otro factor importante para obtener una buena convergencia es el número de elementos en cada corona radial, ya que la mayor diferencia se observa al pasar de G1 a G2 (recuérdese la figura 4.4), donde se incrementan los elementos por corona. Sin embargo, al pasar de G2 a G3 (incremento de coronas) los resultados son similares y sólo se suavizan.

En la figura 4.8 observamos el mismo comportamiento en los flujos de calor Q_i^{NC} (arriba) y Q_e^{NC} (centro); y en la corriente paralela $J_{\parallel}^{\text{NC}}$ (abajo). En cada gráfica superponemos los resultados obtenidos con las distintas mallas

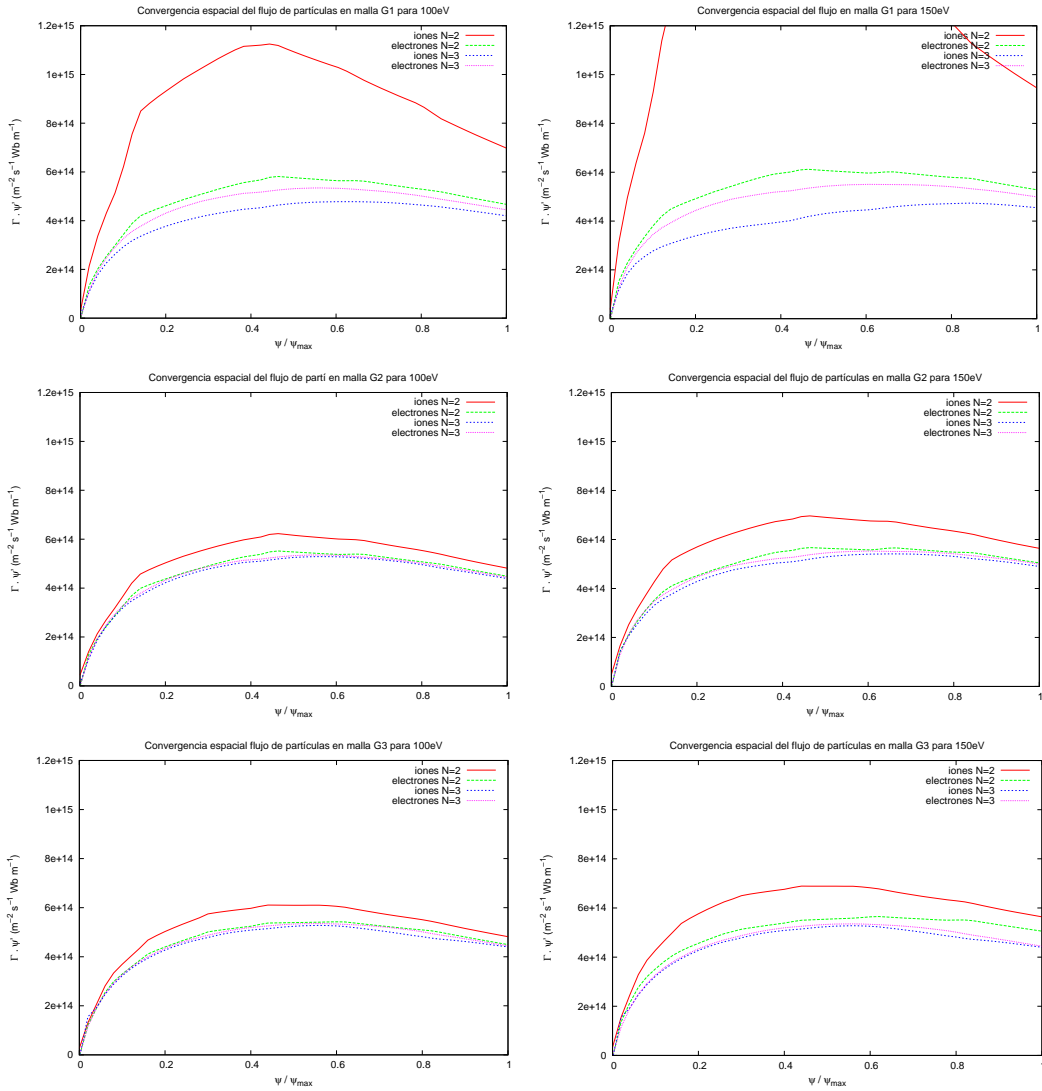


Figura 4.7: Convergencia en función de la malla para el dispositivo T-II a 100 eV (izquierda) y 150 eV (derecha) y mallas G1, G2 y G3 (de arriba a abajo). En cada gráfica se muestra el flujo normalizado de iones y electrones con interpolación espacial 2 y 3.

y órdenes de interpolación. Como antes, las figuras de la izquierda corresponden a 100 eV y las de la derecha a 150 eV. Es interesante notar que las mayores disparidades a baja resolución se encuentran en Q_i^{NC} , mientras que el comportamiento de la corriente es bastante robusto. De nuevo, el efecto del orden de interpolación espacial es muy importante.

Los resultados análogos para las mallas G4 y G5 son similares, por lo que no se muestran para evitar redundancia.

El comportamiento del dispositivo T-I es cualitativamente similar y por lo tanto el orden polinómico es el factor más importante en la convergencia. A modo de ejemplo, la figura 4.9 muestra el flujo de partículas (arriba) y Q_i^{NC} (abajo) obtenidos con la geometría T-I y la malla G6 (figura 4.6). De nuevo, el orden 3 de interpolación espacial parece suficiente.

4.3.2. Convergencia en el espacio de velocidades

En base a los resultados del §4.3.1, adoptamos para las siguientes comprobaciones la malla G2 y un orden polinómico de interpolación espacial $N = 3$.

Estudiemos la convergencia en el espacio de velocidades, cuya precisión viene dada por los $N_\beta \times N_\lambda$ modos en que está expandida la FdD. Presentamos en las figuras 4.11 y 4.12 los perfiles de los flujos y la densidad de corriente paralela obtenidos con dos temperaturas, 100 eV y 200 eV. Se observa que la convergencia es más rápida en el caso de 100 eV, lo cual es lógico puesto que las colisiones actúan en el espacio de velocidades como un operador de difusión que tiende a aniquilar los modos de orden alto. A bajas temperaturas las colisiones dominan sobre la dinámica de convección y, por tanto, basta con un número menor de modos para alcanzar la convergencia.

En adelante usaremos siempre, al menos, $N_\beta \times N_\lambda = 5 \times 8$. Como antes, para no ser redundantes no mostramos las simulaciones análogas para el caso T-I, donde se aprecia un comportamiento de los perfiles cualitativamente similar al de T-II.

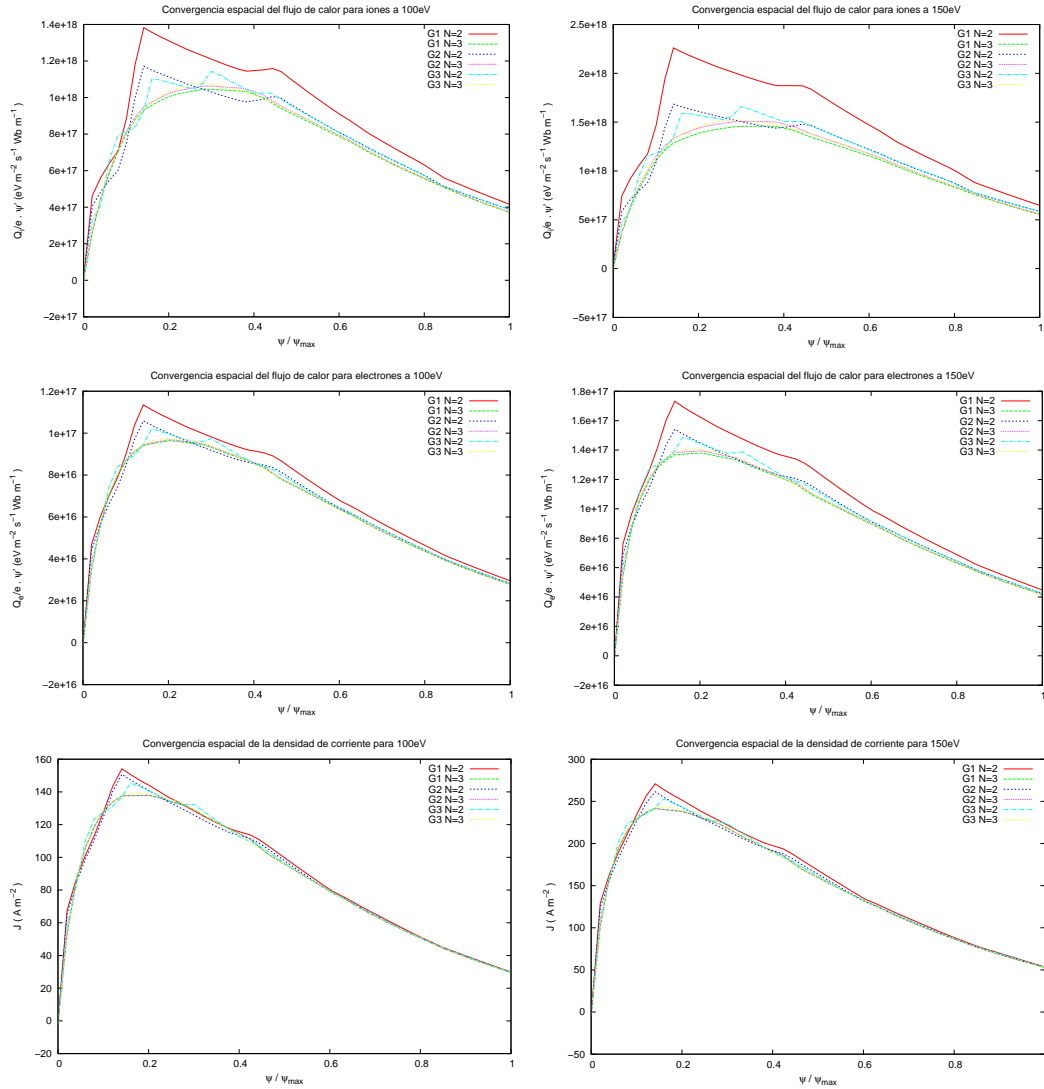


Figura 4.8: Convergencia en función de la malla en la geometría T-II a 100 eV (izquierda) y 150 eV (derecha). De arriba a abajo: flujo de calor iónico normalizado, flujo de calor electrónico normalizado y corriente toroidal. En cada gráfica se muestra el resultado correspondiente a las mallas G1, G2, G3 y usando órdenes de interpolación espacial 2 y 3.

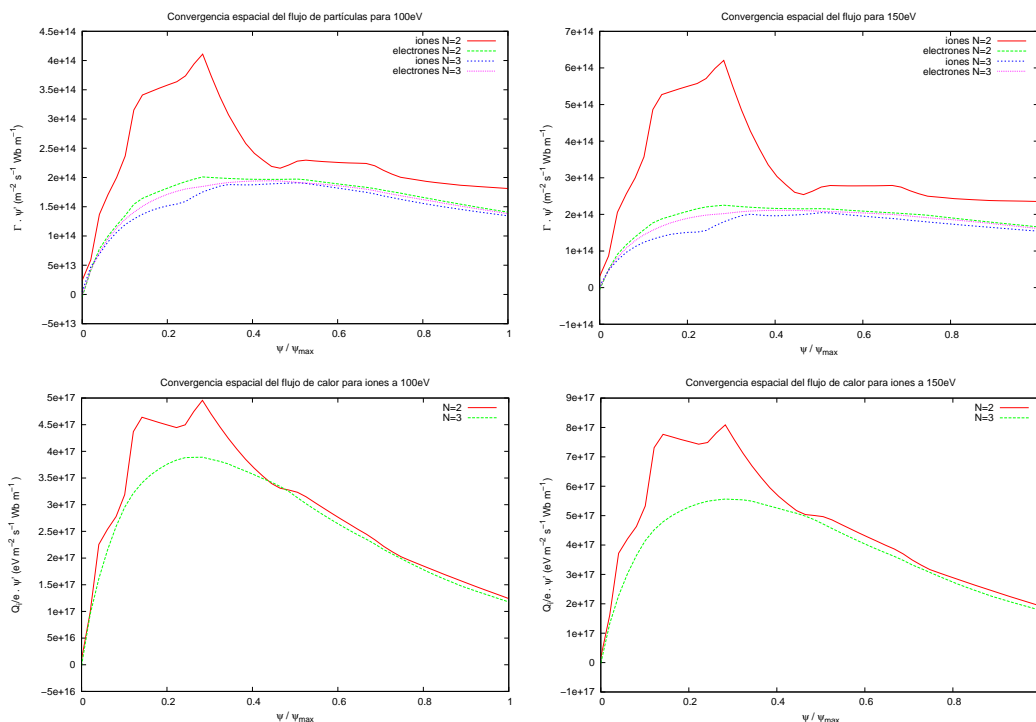


Figura 4.9: Convergencia en función de la malla G6 para el dispositivo T-I a 100 eV (izquierda) y 150 eV (derecha). De arriba a abajo: flujo de partículas y flujo de calor iónico normalizado. En cada gráfica se muestra el resultado usando órdenes de interpolación espacial 2 y 3.

4.4. Comparación con la teoría neoclásica

4.4.1. Fórmulas

Las fórmulas que se han empleado para hacer comparaciones entre teoría y resultados numéricos pueden encontrarse en la revista de Hinton y Hazeltine [7] o, igualmente, en el trabajo numérico de la Ref. [6] que se basa en esta misma formulación. Para facilitar la lectura la resumimos aquí.

Recordemos que en la teoría del transporte neoclásico de Hinton y Hazeltine se hace un estudio para cada régimen de colisionalidad y finalmente (sección VI en [7]) se unifican las expresiones mediante un ajuste válido para cualquier colisionalidad en la aproximación de acoplo débil, que desprecia el efecto sobre los iones de sus colisiones con los electrones. Otro aspecto impor-

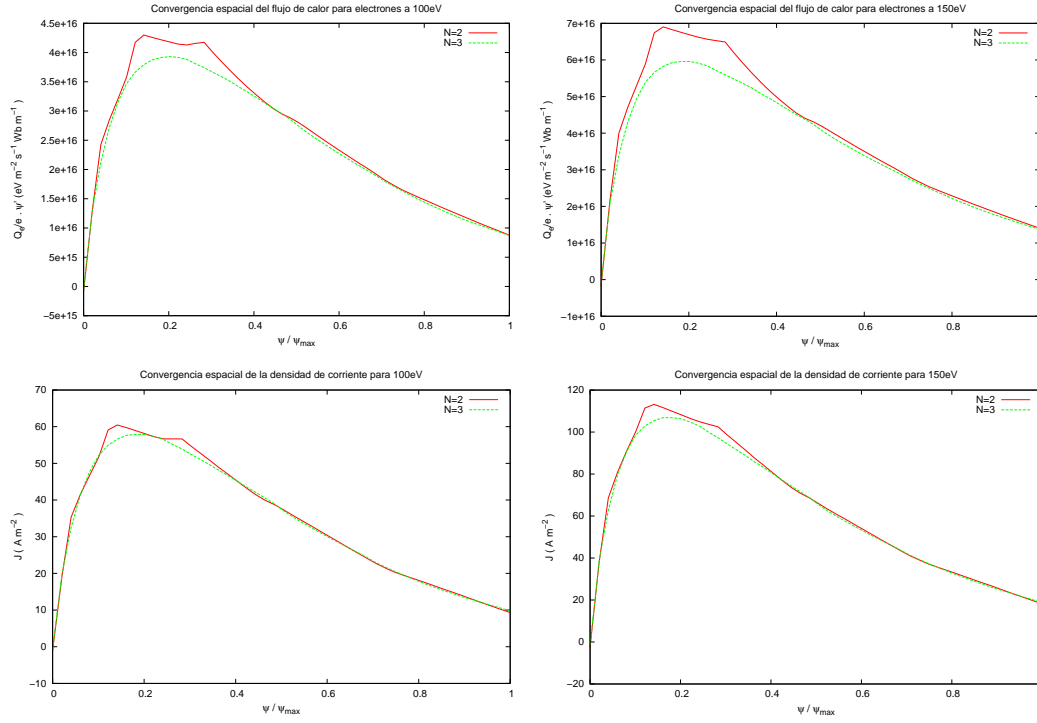


Figura 4.10: Mismas condiciones que en la Fig. 4.9 para el flujo de calor electrónico normalizado (arriba) y la corriente toroidal (abajo).

tante es que, como los autores advierten, se trata de expresiones obtenidas en condiciones de geometría magnética axisimétrica y alta relación de aspecto. En particular, hacen uso de los campos efectivos y las condiciones que dan lugar al dispositivo que hemos llamado T-I en el apartado 4.1.1.

Los flujos neoclásicos de partículas y calor se expresan en función de las fuerzas termodinámicas asociadas a los diversos gradientes del plasma para cada especie $a = \{e, i\}$ (temperatura, T_{0a} ; presión, p_{0a}). Llamando r en vez de ρ a la coordenada radial para evitar confusión con el radio de Larmor, tenemos

$$\frac{\Gamma_e}{n_{0e}} = -\sqrt{\epsilon} \frac{q^2 \rho_{e0}^2}{\tau_e \epsilon^2} \left(K_{11} A'_{1e} + K_{12} \frac{\partial \ln T_{0e}}{\partial r} \right) \quad (4.39)$$

$$\frac{Q_e}{n_{0e} T_{0e}} = -\sqrt{\epsilon} \frac{q^2 \rho_{e0}^2}{\tau_e \epsilon^2} \left(K_{12} A'_{1e} + K_{22} \frac{\partial \ln T_{0e}}{\partial r} \right), \quad (4.40)$$

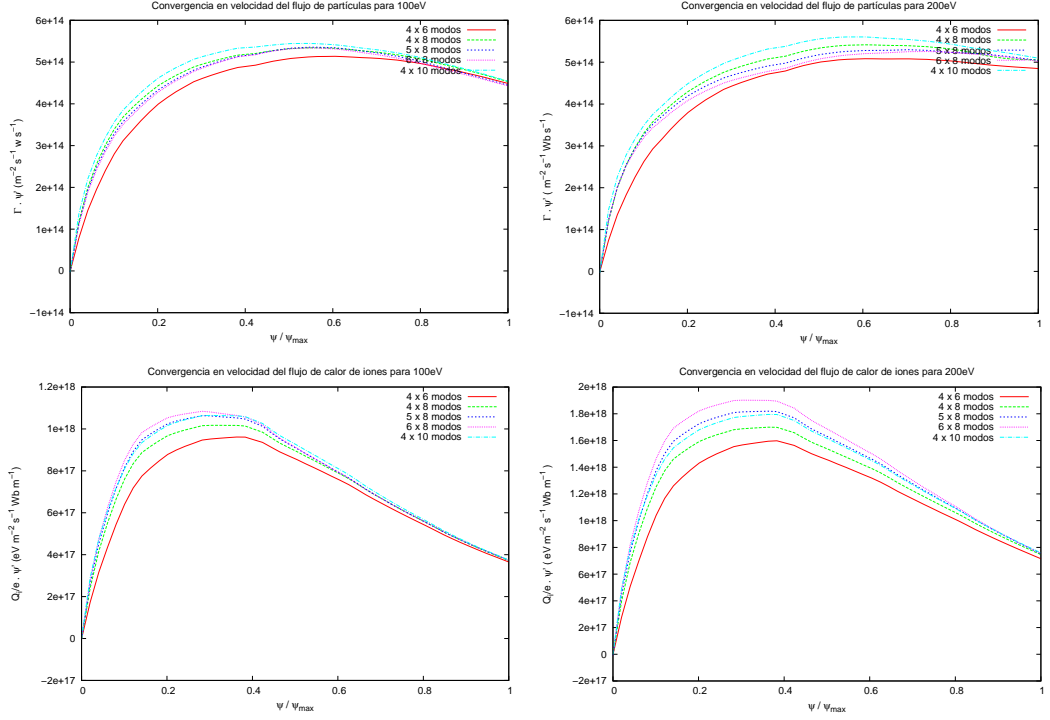


Figura 4.11: Convergencia en función del número de modos de velocidad para el dispositivo T-II a 100 eV (izquierda) y 200 eV (derecha). De arriba a abajo: flujo de partículas y flujo de calor iónico. En cada gráfica se muestran los resultados para $[N_\beta, N_\lambda] = [4, 6], [4, 8], [4, 10], [5, 8]$ y $[6, 8]$ modos en el espacio de velocidades.

siendo

$$A'_{1e} = \frac{\partial \ln p_{0e}}{\partial r} - \frac{5}{2} \frac{\partial \ln T_{0e}}{\partial r} + \frac{T_{0i}}{T_{0e}} \left(\frac{\partial \ln p_{0i}}{\partial r} - \frac{A_0}{1 + \nu_{*e}^2 \epsilon^2} \frac{\partial \ln T_{0i}}{\partial r} \right),$$

$$A_0 = \left(\frac{1,17 - 0,35\sqrt{\nu_{*i}}}{1 + 0,7\sqrt{\nu_{*i}} - 2,1\nu_{*i}^2 \epsilon^3} \right) \frac{1}{1 + \nu_{*i}^2 \epsilon^3}.$$

En estas expresiones se han hecho algunas simplificaciones –igual que en la Ref. [6]– con respecto a las dadas por Hinton y Hazeltine, como aproximar $(r/R_0)^2 \approx \epsilon^2$ y desconsiderar el término relacionado con $\langle E_{||}/B_{P0} \rangle$. La frecuencia ciclotrónica se define aquí con respecto al campo efectivo, $\Omega_{0a} = q_a B_{T0}/m_a$. Los radios de Larmor para cada especie están expresados mediante la velocidad térmica en base a esta frecuencia ciclotrónica,

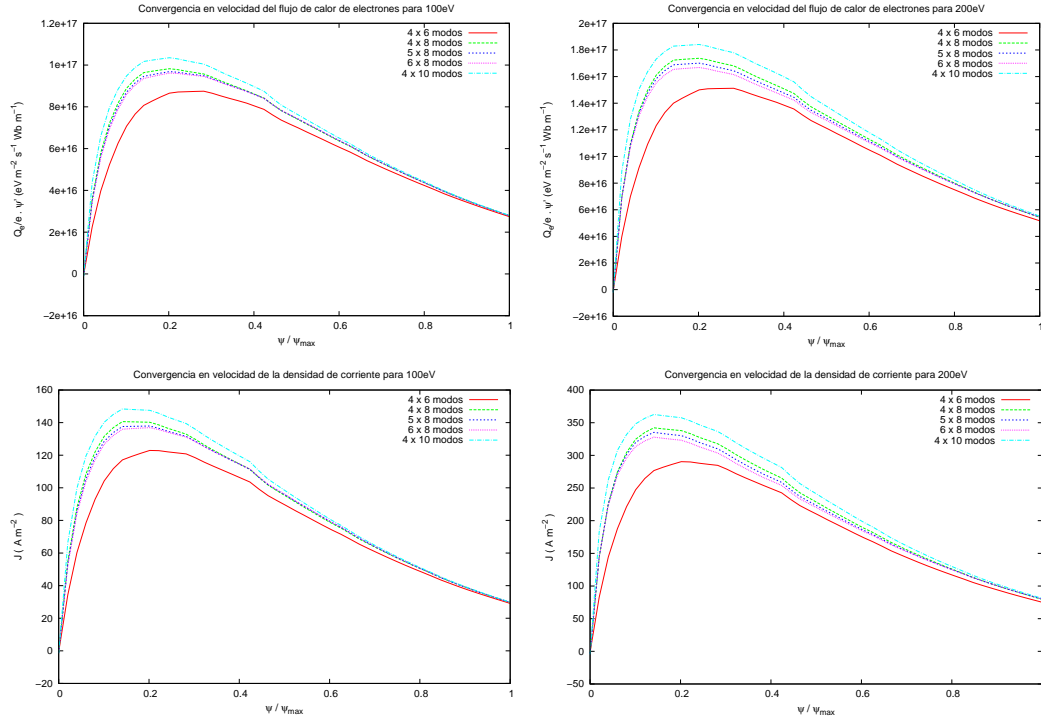


Figura 4.12: Mismas condiciones que en la fig. 4.11 para el flujo de calor electrónico normalizado y la densidad de corriente toroidal.

$\rho_{0a} = v_{ta}/\Omega_{0a}$, y las frecuencias de colisión se presentan en forma adimensional,

$$\nu_{*a} = \frac{\sqrt{2}qR_0}{\tau_a \epsilon^{3/2} v_{ta}}, \quad (4.41)$$

donde q es el factor de seguridad. Para no confundirlo con las cargas de las especies, éstas llevan el correspondiente subíndice. Ahora el parámetro ϵ es la inversa de la relación de aspecto A y aparece en la teoría por su relación con la fracción de partículas atrapadas en una geometría axisimétrica sencilla.

Tomando la temperatura en unidades de energía, los tiempos de colisión en el sistema CGS son

$$\tau_{ab}^{-1} = \frac{\sqrt{2}\pi q_a^2 q_b^2 n_{0b}}{m_a^{1/2} T_{0a}^{3/2}} \ln \Lambda,$$

y en el sistema SI se expresan como

$$\tau_{ab}^{-1} = \frac{\sqrt{2}q_a^2 q_b^2 n_{0b}}{\epsilon_0^2 16\pi m_a^{1/2} T_{0a}^{3/2}} \ln \Lambda.$$

siendo ϵ_0 la constante dieléctrica del vacío. Además usaremos

$$\tau_i^{-1} = \left(\frac{4}{3} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) \tau_{ii}^{-1}$$

$$\tau_e^{-1} = \left(\frac{4}{3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \right) \tau_{ei}^{-1}.$$

Las constantes adicionales que faltan vienen dadas por:

$$K_{mn} = K_{mn}^{(0)} \left[\frac{1}{1 + a_{mn}\sqrt{\nu_{*e}} + b_{mn}\nu_{*e}} + \frac{\epsilon^{3/2}(c_{mn}^2/b_{mn})\nu_{*e}\epsilon^{3/2}}{1 + c_{mn}\nu_{*e}\epsilon^{3/2}} \right],$$

donde deben tomarse los valores numéricos

$$\left[K_{11}^{(0)}, a_{11}, b_{11}, c_{11} \right] = [1,04, 2,01, 1,53, 0,89]$$

$$\left[K_{12}^{(0)}, a_{12}, b_{12}, c_{12} \right] = [1,20, 0,76, 0,67, 0,56]$$

$$\left[K_{22}^{(0)}, a_{22}, b_{22}, c_{22} \right] = [2,55, 0,45, 0,43, 0,43].$$

El flujo de calor iónico viene dado por

$$\frac{Q_i}{n_{0i}T_{0i}} = -\sqrt{\epsilon} \frac{q^2 \rho_{i0}^2}{\tau_i \epsilon^2} K_2^{(0)} \left[\frac{1}{1 + a_2\sqrt{\nu_{*i}} + b_2\nu_{*i}} + \frac{(c_2^2/b_2)\nu_{*i}\epsilon^3}{1 + c_2\nu_{*i}\epsilon^{3/2}} \right] \frac{\partial \ln T_{0i}}{\partial r}, \quad (4.42)$$

con las constantes

$$\left[K_2^{(0)}, a_2, b_2, c_2 \right] = [0,66, 1,03, 0,31, 0,74]$$

según corresponden al modelo de Hinton y Hazeltine.

Una cantidad difícil de estimar habitualmente, pero muy importante, es la corriente del plasma. Una contrapartida teórica se encuentra en la ecuación 6.122 de [7], derivada para máquinas *tokamak* de gran relación de aspecto. Si se tiene en cuenta que en dicha referencia E_{\parallel} es el campo inductivo (despreciado en este capítulo, ver 4.2.3) se obtiene

$$J = \langle J_{\parallel} B \rangle / B_{T0} = -n_{0e} T_{0e} \sqrt{\epsilon} \frac{q}{\epsilon^2 \epsilon B_{po}} \left(K_{13} A'_{1e} + K_{23} \frac{\partial \ln T_{0e}}{\partial r} \right) \quad (4.43)$$

donde $K_{13} = 2,30$, $K_{23} = 4,19$ y A'_{1e} se ha definido arriba. Esta corriente, en los regímenes acolicionales, tiene una fuerte contribución de la llamada corriente de *bootstrap*. Por otro lado, la corriente toroidal promedio es

$$J_{\text{tor}} = \langle \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\phi \rangle = \langle J_\phi \rangle$$

donde $\hat{\mathbf{u}}_\phi$ es el vector unitario en la dirección toroidal. Puesto que vamos a calcular en casos de alta relación de aspecto, puede aproximarse $\mathbf{B} \simeq \mathbf{B}_{T0}$. Así $\mathbf{b} \simeq \hat{\mathbf{u}}_\phi$ y la corriente puede estimarse numéricamente como

$$J = \langle J_\parallel B \rangle / B_{T0} \simeq \langle J_\parallel \rangle \simeq \langle J_\phi \rangle = J_{\text{tor}}.$$

Se han programado todas estas expresiones para obtener los valores teóricos que mostraremos en el §4.4.3.

4.4.2. Ambipolaridad

Como es sabido, los flujos colisionales de las distintas especies del plasma no son en general intrínsecamente ambipolares, ni siquiera para un *tokamak* axisimétrico [15]. Sin embargo, este último caso sí permite deducir la condición de ambipolaridad, aunque aproximadamente, usando las ecuaciones del movimiento. Recordemos brevemente el porqué [7].

Si, como debe ser, el operador de colisión \mathcal{C}_{ab} entre las distintas especies conserva la energía y el momento en las colisiones electrostáticas, la fuerza de fricción colisional $\mathbf{F}_a = \sum_b \int d^3\mathbf{v} m_a \mathbf{v} \mathcal{C}_{ab}$, sumada a todas las especies, debe ser nula:

$$\sum_a \mathbf{F}_a = 0.$$

En consecuencia, la suma de flujos “clásicos”

$$\mathbf{\Gamma}^C = -\frac{1}{qB} \mathbf{b} \times \mathbf{F}$$

da lugar a la condición $\sum_a q_a \mathbf{\Gamma}_a^C = 0$. En el caso particular de los sistemas axisimétricos, la conservación del momento colisional permite afirmar que los flujos totales son igualmente ambipolares hasta el segundo orden. En la Ref. [7] se expresa así:

$$\sum_a q_a \langle \mathbf{\Gamma}_a \cdot \nabla \psi \rangle = 0,$$

donde los corchetes indican promedio a la superficie de flujo etiquetada por la coordenada ψ y Γ_a representa el flujo colisional neoclásico de partículas de la especie a . Estas condiciones (simetría, orden en el parámetro de radio de Larmor y propiedades de conservación en el operador de colisión) se dan en las ecuaciones que haremos evolucionar, de manera que la ambipolaridad “intrínseca” es una primera condición que el código debe verificar. Por supuesto, en cálculos más avanzados la ambipolaridad debe ser consecuencia de los campos eléctricos autoconsistentes.

4.4.3. Comparaciones

Vamos ahora a comparar los flujos de partículas y de calor, así como la corriente toroidal, con la teoría neoclásica. En este apartado se usa como masa iónica la del deuterio para que los resultados sean directamente comparables con los resultados numéricos de la Ref. [6]. Antes de seguir advertimos de que en los desarrollos teóricos se hacen expansiones de la FdD que no son iguales a las del cálculo numérico. En éste, la precisión de la perturbación a la maxwelliana que se toma como estado de referencia viene dada por el número de modos tomados en la expansión, es decir, por los valores N_β y N_λ como se explica en el §2.3.4. En la obtención de las fórmulas Ecs. 4.39, 4.40 y 4.42 se ha usado [7] una expansión de g_1 en potencias de la colisionalidad para resolver la Ec. 4.29 y, posteriormente, una expansión en la relación de aspecto (inversa) para el caso toroidal axisimétrico. Otro aspecto importante es que los resultados son sensibles al operador de colisión (véase, precisamente, la Ref. [6], donde se estudian las diferencias entre varios operadores de colisión comúnmente aceptados) y las comparaciones se basan en operadores diferentes. Como se expuso en el capítulo 2, nuestras simulaciones se basan en un operador de colisión bastante reciente [16], distinto tanto al usado en las formulaciones teóricas como en las simulaciones de la Ref. [6]. Pese a todo, si las comparaciones se efectúan en condiciones típicas de colisionalidad cabe esperar que los resultados de teoría y simulaciones se encuentren claramente dentro del mismo orden de magnitud y, lo que es más importante, que muestren un comportamiento semejante frente a la colisionalidad.

Ambipolaridad

En primer lugar, en la figura 4.13 se comparan los perfiles de los flujos de partículas Γ_i^{NC} y Γ_e^{NC} para estudiar la ambipolaridad en simulaciones con

temperatura electrónica central de 10, 50, 100, 150 y 200 eV (ver §4.1.2). Para la discretización se utiliza la malla G5, orden 3 en interpolación espacial y $N_\beta \times N_\lambda = 6 \times 10$ modos en el espacio de velocidades. Los flujos se han calculado mediante las Ecs. 4.37 y 4.38 y se observa una pequeña desviación de la ambipolaridad a medida que aumenta la temperatura. Como se ha visto en el §4.3.1, esto es debido a la discretización espacial, en concreto a la resolución en la coordenada poloidal θ . Debemos advertir que la aparente no ambipolaridad no se debe a que el operador de colisión no conserve el momento lineal. Estimando los flujos a partir del operador de colisión, éstos son exactamente ambipolares –precisión de máquina de cómputo– porque el operador de colisión utilizado garantiza la conservación del momento. A cambio, en el cálculo de las integrales Ecs. 4.37 y 4.38 se usa un número limitado de modos de la función de distribución y se evalúa una integral en cuya precisión interviene la malla de cálculo. A medida que se incrementa la precisión geométrica, la ambipolaridad a través de las Ecs. 4.37 y 4.38 se observa mejor.

Flujos de partículas y calor

Una vez hecha la comprobación fundamental de la ambipolaridad, vamos a comparar los resultados de las simulaciones (mantenemos los parámetros de antes: malla G5, interpolación $N = 3$ y $N_\beta \times N_\lambda = 5 \times 8$) con los resultados obtenidos mediante las fórmulas del §4.4.1. A partir de aquí no haremos distinción entre electrones e iones para el flujo de partículas y nos referiremos sin más al flujo de partículas Γ^{NC} . En el caso de los flujos de calor, mostrados en la figura 4.15 para los iones y en la 4.16 para los electrones, se encuentra un comportamiento parecido, aunque con mayor discrepancia para el flujo de calor iónico. En este caso, el flujo de calor Q_i^{NC} según la Ec. 4.42 es notablemente inferior en la mitad exterior del plasma.

La figura 4.14 muestra los perfiles de Γ^{NC} obtenidos por simulación (izda.) a varias temperaturas. En la figura de la derecha se representan los mismos perfiles según se obtienen de la fórmula 4.39. Se observa mayor concordancia a baja colisionalidad (altas temperaturas), probablemente porque la diferencia entre operadores de colisión es menos importante aquí.

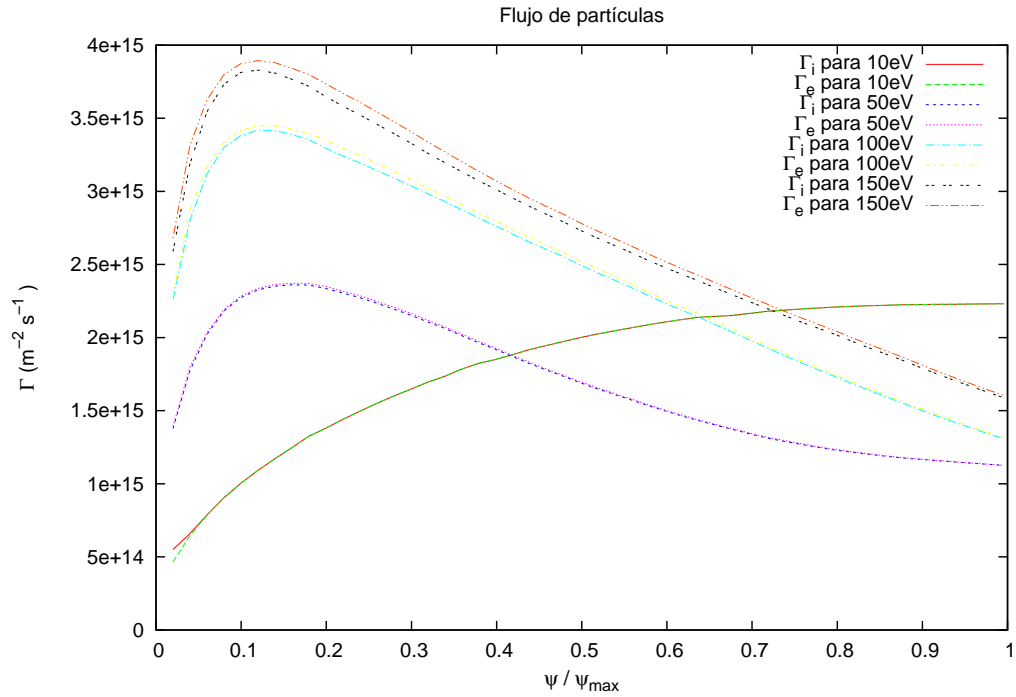


Figura 4.13: Estudio de ambipolaridad. Se muestran los perfiles de los flujos neoclásicos de electrones e iones usando perfiles de temperatura con distinto valor central.

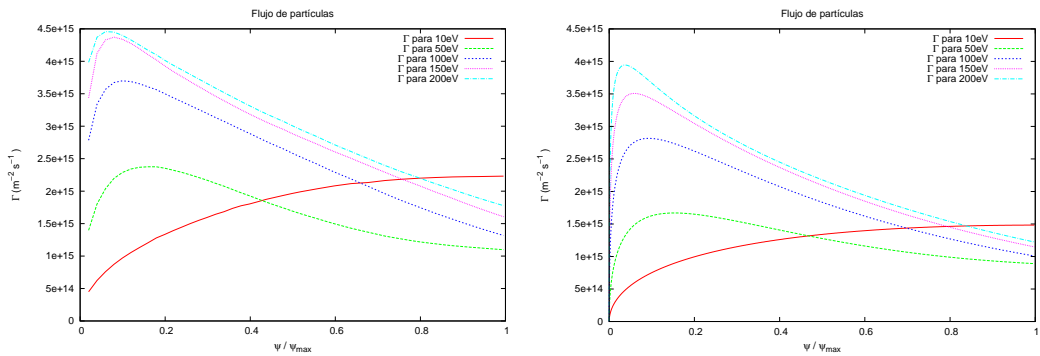


Figura 4.14: Flujos de partículas obtenidos por simulación (izquierda) y mediante la fórmula teórica Ec. 4.39 (derecha).

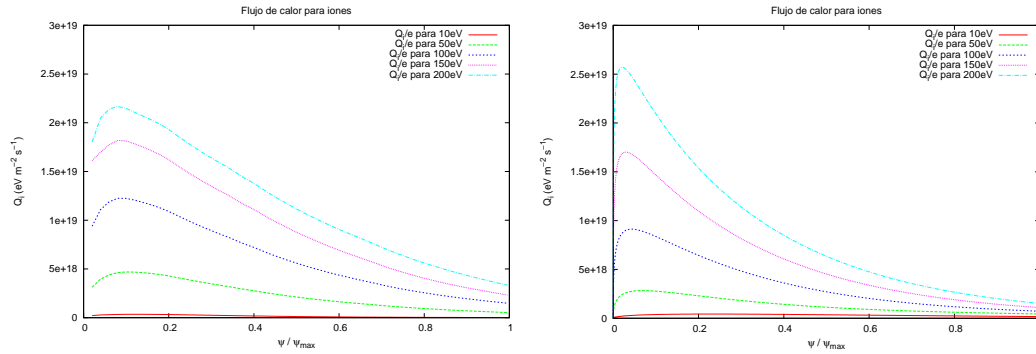


Figura 4.15: Flujos de calor iónico obtenidos por simulación (izquierda) comparados con los obtenidos mediante la fórmula Ec. 4.42 de la teoría (derecha).

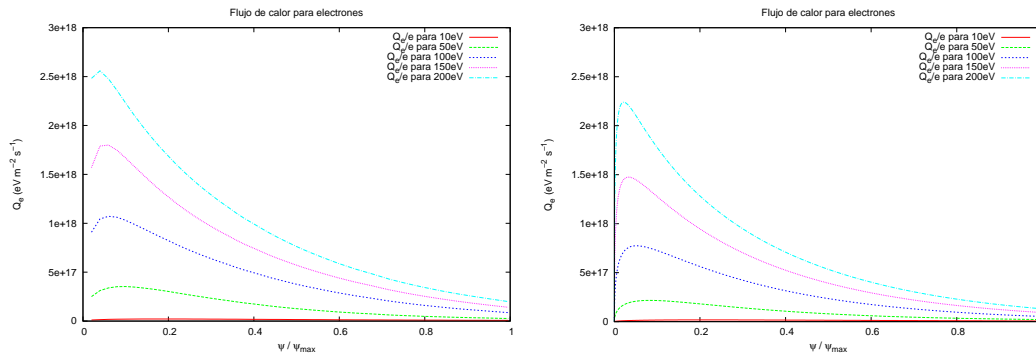


Figura 4.16: Flujos de calor electrónico obtenidos por simulación (izquierda) comparados con los obtenidos mediante la fórmula Ec. 4.40 de la teoría (derecha).

Corriente toroidal

Uno de los usos más importantes para los que se ha diseñado el código de transporte es el cálculo de la corriente toroidal neoclásica. Ésta es muy costosa de calcular en cuanto la geometría magnética es complicada, y hoy por hoy imposible de estimar razonablemente por medios analíticos en geometrías tan complejas como, por ejemplo, las configuraciones de tipo *Heliac* [17]. Por otro lado, el tratamiento del transporte paralelo es muy delicado incluso en códigos que lo contemplan, como el nuestro. Es, entonces, del todo relevante establecer comparaciones con los casos en los que existen estimaciones teóricas aceptables.

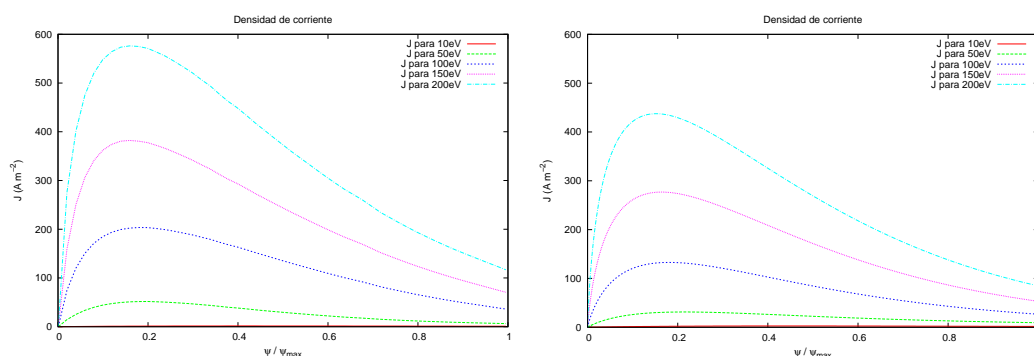


Figura 4.17: Densidad de corriente toroidal obtenida por simulación numérica (izquierda) comparados con la teoría (derecha).

Los perfiles de la densidad de corriente toroidal, tanto simuladas como teóricas, se muestran en la figura 4.17 para el mismo conjunto de perfiles de temperatura que en los casos anteriores. De nuevo las tendencias y valores son similares en todas las temperaturas, aunque el máximo de la corriente, cerca del eje magnético, viene a ser en torno a un 25% mayor según las simulaciones.

Colisionalidad

Para comprender mejor las propiedades de los plasmas, suele ser habitual estudiar los flujos y la corriente en función de la colisionalidad (Ec 4.41). En la figura 4.18 se muestran los resultados provenientes de las simulaciones y de la teoría. Se ha usado en el eje de abscisas una variable proporcional a la colisionalidad con el objetivo de hacer más sencilla la comparación con los resultados numéricos de [6].

Tanto en los flujos como en las corrientes, las curvas son parecidas pero no idénticas. Las diferencias pueden achacarse principalmente al uso de operadores de colisión diferentes. No obstante, las pequeñas aproximaciones efectuadas durante el desarrollo teórico en el modelo, y las necesarias para obtener resultados teóricos, pueden dar lugar también a una ligera discrepancia. Por lo demás, de los datos obtenidos puede mencionarse el crecimiento de los flujos con la colisionalidad, algo bien conocido. Para observar el régimen de “plateau” es necesario añadir simulaciones a menor colisionalidad que las estudiadas en este capítulo, algo que se deja para el futuro. Sin embargo es de destacar que usando las mismas unidades y radio medio que en la Ref. [6]

se obtiene un resultado muy semejante en las colisionalidades exploradas.

4.4.4. Excursiones radiales de los centros guía

Una manera indirecta de ver la validez del primer orden en los cálculos es comprobar que la anchura de las órbitas, consecuencia de las derivas por curvatura, son despreciables en el problema de los tokamaks estudiados. La excursión radial de las llamadas “órbitas banana” (Ec. 7.23 en [4])

$$\Delta\rho = \epsilon^{1/2} \rho_p,$$

donde el radio de giro poloidal se define, usando el campo poloidal B_P , como $\rho_p = mv_t/qB_P$ y, recordemos, ϵ aquí representa la inversa de la relación de aspecto del *tokamak*. Teniendo en cuenta los resultados de la sección 4.1.1, $B_{P0} = 0,1913\rho$ para ambos dispositivos T-I y T-II, se puede sintetizar

$$\Delta\rho = \frac{1}{0,1913} \sqrt{\frac{2m}{qR_0}} \sqrt{\frac{(T/q)}{\rho}}.$$

Para iones se tiene

$$(\Delta\rho)_i = 6,38 \cdot 10^{-4} \sqrt{\frac{T_i}{\rho}},$$

y para electrones

$$(\Delta\rho)_e = 1,05 \cdot 10^{-5} \sqrt{\frac{T_e}{\rho}}.$$

dadas T en eV y ρ en m; cantidades que son despreciables frente a las longitudes características del sistema, en las condiciones estudiadas salvo para ρ muy cercano al eje.

Por otro lado, las orbitas denominadas *de patata* no tenidas en cuenta en la teoría Neoclásica viven en ρ menor que ρ_{max} dado por (Ec. 7.28 en [4])

$$\rho_{max}^3 = \rho_p^2 \epsilon^2 R = (\Delta\rho)^2 \epsilon R,$$

que puede aproximarse para cada especie por

$$\begin{aligned} (\rho_{max})_i &= 7,41 \cdot 10^{-3} T_i^{1/3} \\ (\rho_{max})_e &= 4,80 \cdot 10^{-4} T_e^{1/3}, \end{aligned}$$

dada la temperatura otra vez en eV. De nuevo, en comparación con el sistema, $\Delta\rho$ toma valores despreciables en las condiciones estudiadas.

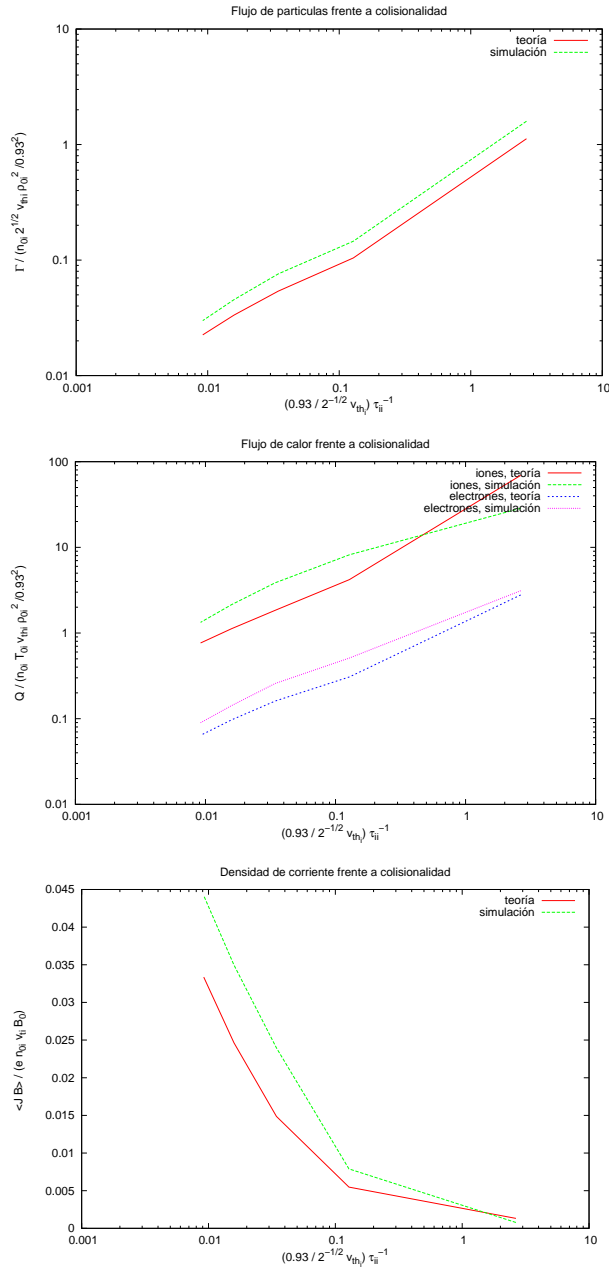


Figura 4.18: De arriba a abajo, flujo de partículas, flujo de calor iónico, flujo de calor electrónico y corriente para $r=0.46$ en función de la colisionalidad

Referencias

- [1] R. J. Bickerton, *et al*, Nature Phys. Sci. **229**, 110 (1971).
- [2] K. Itoh, S.-I. Itoh, A. Fukuyama, *Steady state tokamak sustained by bootstrap current without seed current*, Research report NIFS Series, NIFS-159, (1992).
- [3] J. P. Freidberg, *Ideal magnetohydrodynamic theory of magnetic fusion systems*, Rev. Mod. Phys. **54** 801 (1982).
- [4] P. Helander, D. J. Sigmar, *Collisional Transport in Magnetized Plasmas*, Cambridge University Press, ISBN: 0-521-80798-0, (2002).
- [5] K. Nishikawa, M. Wakatani, *Plasma physics*, Springer Series on Atoms and Plasmas, ISBN 3-540-65285-X, (2000).
- [6] E. A. Belli, J. Candy, *Kinetic calculation of neoclassical transport including self-consistent electron and impurity dynamics* Plasma Phys. Control. Fusion **50**, 095010, (2008).
- [7] F. L. Hinton, R. D. Hazeltine, *Theory of plasma transport in toroidal confinement systems*, Rev. Mod. Physics **48**(2), 239, (1976).
- [8] V. Tribaldos, J. Guasp, *Neoclassical global flux simulations in stellarators*, Plasma Phys. Control. Fusion, **47** 545 (2005).
- [9] H. J. de Blank, *Guiding center motion*, Trans. Fusion Sci. Technol., **45**, 47–54 (2004).
- [10] R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 1. Classical transport theory*, North Holland (1988).

- [11] H. K. Wimmel, *Consistent guiding center drift theories*, J. Phys. Sci. **37**(9), 985–999 (1982); Z. Naturforsch. **38A**, 341 (1982).
- [12] R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 2. Neoclassical transport theory*, North Holland (1988).
- [13] M. Taguchi, *Neoclassical heat flux due to poloidal electric field in arbitrary collisionality regime*, Plasma Phys. Control. Fusion **35**, 193 (1993).
- [14] T.E. Stringer, *Inclusion of poloidal potential variation in neoclassical transport*, Phys. Fluids B **3**(4), 981 (1991).
- [15] L. M. Kovrizhnikk, *Whether diffusion in axisymmetric confinement systems is intrinsically ambipolar*, Comm. Mod. Phys. E **18** (3), 187–200 (1997).
- [16] J. Y. Ji, E. D. Held, *Exact linearized Coulomb collision operator in the moment expansion*, Phys. Plasmas **13**, 102103 (2006).
- [17] A. H. Boozer *et al.*, , Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research 1982, Proc. 9th Int. Conf. Baltimore, 1982, Vol. III, p. 129, IAEA, Vienna (1983).

Capítulo 5

Cálculos en una geometría compleja: TJ-II

Por último, vamos a mostrar algunos resultados preliminares obtenidos para una máquina con una complejidad geométrica significativa: el *stellarator* TJ-II [1]. El objetivo de este capítulo no es tanto obtener resultados de física como comprobar la capacidad del código para simular este problema. Además, en el caso del TJ-II es difícil encontrar contrapartidas teóricas, precisamente por la complejidad de la máquina. Los cálculos que se muestran a continuación representan el estado actual del código y prueban que se tiene, de hecho, una herramienta con la que pueden empezarse a encarar trabajos de física. En la última sección se darán indicaciones sobre algunas de las tareas que se pueden hacer en un futuro inmediato.

5.1. Geometría magnética

El campo magnético se precalcula en la inicialización de las simulaciones lo más exactamente posible en los puntos de la malla necesarios. Esta es una clara ventaja con respecto a métodos de partículas, donde el cálculo del campo magnético se hace tan a menudo (en cada iteración temporal de cada partícula) que se utilizan interpolaciones y simplificaciones para el cómputo del campo. El método utilizado para el cálculo del campo magnético es la integración numérica en hilos de corriente que representan la geometría completa [2, 3, 4]. Las bobinas de campo toroidal, campo vertical y bobina central circular (ver figura 5.1) se simulan como anillos de corriente indivi-

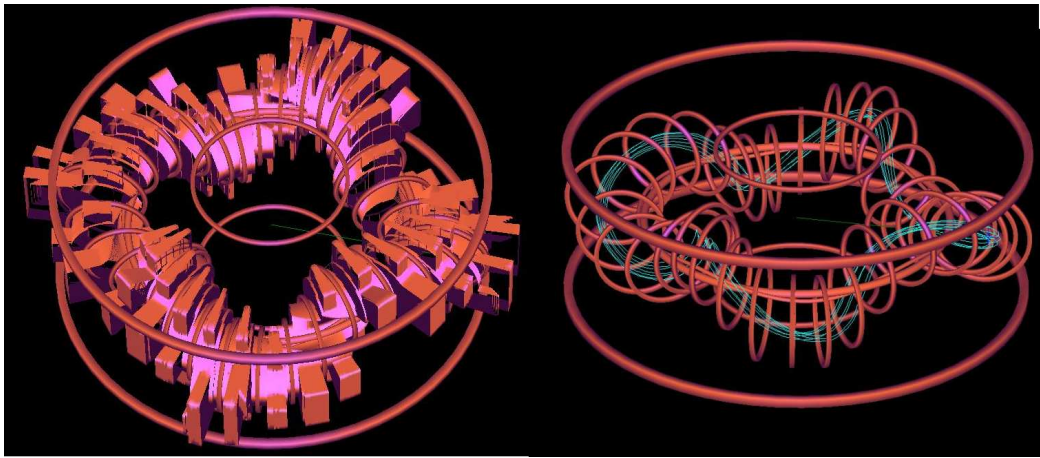


Figura 5.1: A la izquierda, cámara de vacío del TJ-II; a la derecha, bobinas y trayectoria de un ion confinado en el interior del dispositivo

duales. Por otro lado, en la bobina helicoidal es necesario tener más cuidado y se hacen necesarios un mínimo de 10 hilos de corriente para el modelo si se quiere tener una transformada rotacional fidedigna.

El campo magnético modelizado describe una configuración magnética de vacío, pues los dispositivos del tipo *stellarator* no requieren de corriente interna en el plasma para obtener superficies magnéticas y por tanto confinamiento [5]. Las descargas típicas en el dispositivo TJ-II no alcanzan valores de β superiores al 1%. De hecho los valores más altos en la actualidad están en torno al 0.5%, luego es de suponer que no hay una desviación significativa del campo magnético de vacío¹.

Se ha escogido la configuración más típica del dispositivo, denominada “100_44_64”, donde los números proceden de la corriente que pasa por las distintas bobinas.

¹Se recuerda que β indica la proporción entre la presión del plasma, y por tanto la posible corriente generada por el mismo, y la presión magnética. Cuanto mayor es β , más significativos serían los efectos del plasma sobre el campo magnético

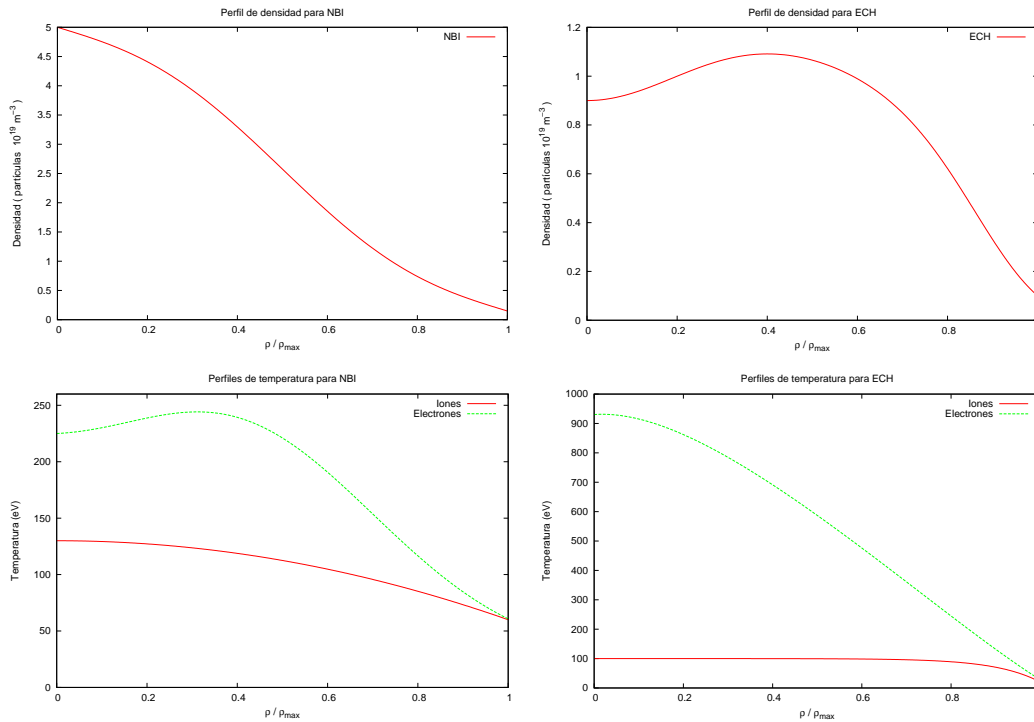


Figura 5.2: Perfiles radiales de densidad (arriba) y temperatura (abajo) para descargas del tipo NBI (izquierda) o ECH (derecha).

5.2. Condiciones de trabajo

Se han llevado a cabo simulaciones con plasmas típicos de descargas NBI² y ECH³. En la figura 5.2 se muestran modelos de los correspondientes perfiles radiales.

El mallado utilizado en la discretización espacial se obtiene gracias al software descrito en el capítulo 3. Se toman dos mallas diferentes, una para NBI y otra para ECH (figuras 5.3 - 5.6). En el caso de ECH se prefirió tomar un mallado que no llegara al borde para alcanzar una mayor precisión en la

²NBI (*Neutral Beam Injection*) es un tipo de calentamiento consistente en inyectar partículas neutras a gran velocidad que incrementen la temperatura del plasma mediante transferencia de energía por intercambio de carga con los iones del haz [6].

³ECH (*Electron Cyclotron Heating*), otro modo de calentamiento basado en el incremento de la energía de las partículas del plasma mediante una fuente de microondas en resonancia con el giro de Larmor de los electrones [7].

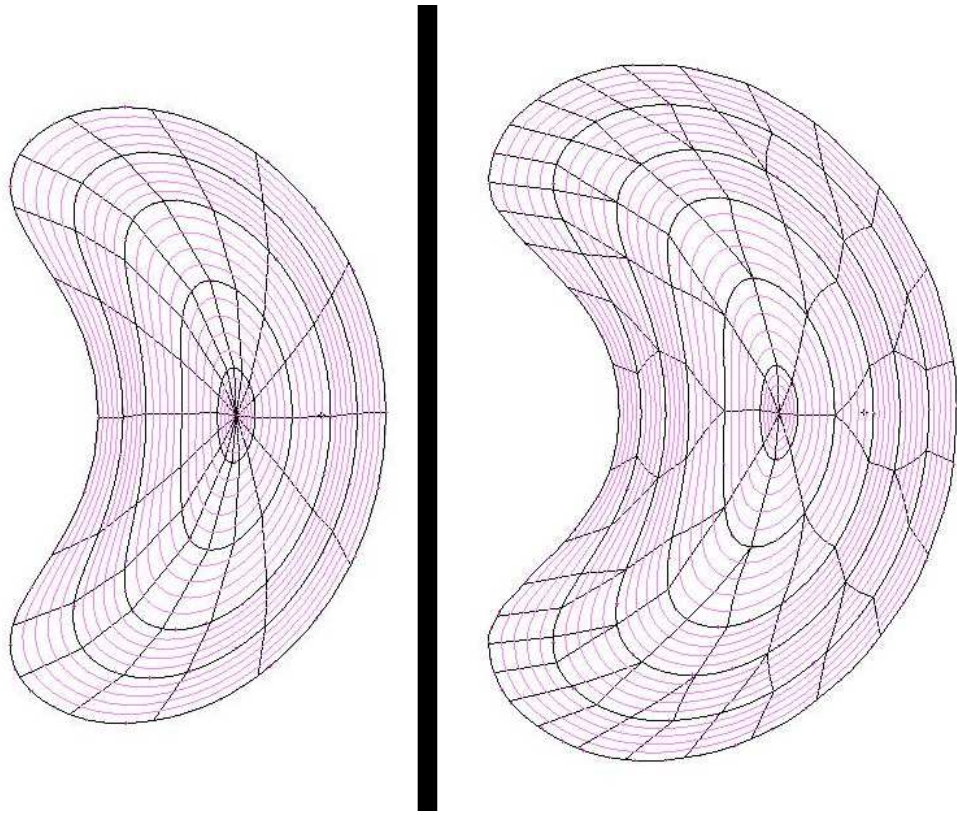


Figura 5.3: Sección transversal de mallado para ECH (izquierda) y NBI (derecha). Obsérvese que la malla de ECH tiene una sección menor, pues solo cubre un 85% en radio menor que el caso NBI.

zona central y agilizar también las simulaciones, motivo por el cual la sección del plasma es menor en este caso pese a que la configuración magnética es la misma.

En cada elemento de la malla se usan polinomios de orden 2 para aproximar las variaciones espaciales de la FdD (en las tres coordenadas espaciales).

El estudio se ha llevado a cabo con el mismo modelo de transporte *local* que en el capítulo 4, algo no del todo justificado, pues existen evidencias de que el transporte *no local* cumple un papel relevante aún por determinar en este tipo de máquinas [8, 9, 10].

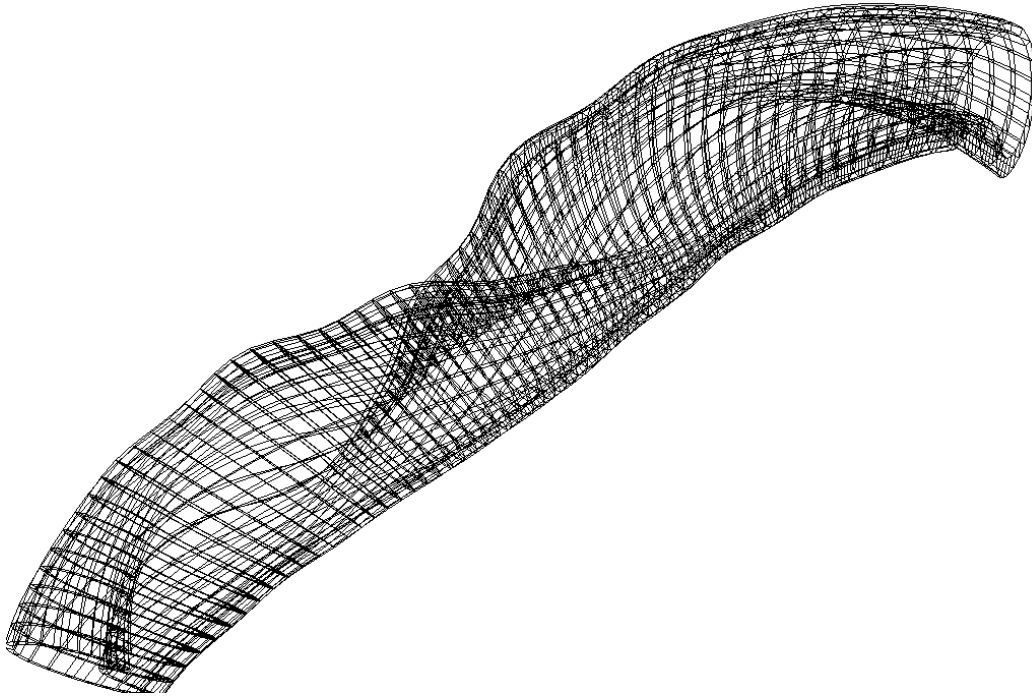


Figura 5.4: Detalle de mallado NBI (un cuadrante de la corona exterior).

5.3. Estudio de convergencia

Se utilizará siempre la misma malla espacial para cada tipo de descargas (NBI o ECH) y el mismo número de modos en velocidad, $N_\beta=4$. En cuanto a N_λ se estudiará en tres valores (6,8,10) pues se ha encontrado en la práctica que es la discretización más lenta en converger. En las figuras 5.7 y 5.8 se muestran perfiles de flujos y corriente obtenidos por simulación para descargas ECH y NBI respectivamente (sin campo eléctrico radial).

El número de modos en λ necesarios para describir la función de distribución, como era de esperar, es ahora superior al del caso *tokamak*. Esto es lógico puesto que el TJ-II posee un fuerte rizado [9, 11] y una variación significativa de campo desde el *hard core* (zona de alto campo) al exterior (zona de bajo campo), además de una complicada geometría. Parece necesario para tener una correcta convergencia utilizar $N_\lambda \gtrsim 10$. No obstante, los perfiles son cualitativamente parecidos (salvo factor constante) a medida que crece el número de modos, excepto en la corriente toroidal que presenta un cambio

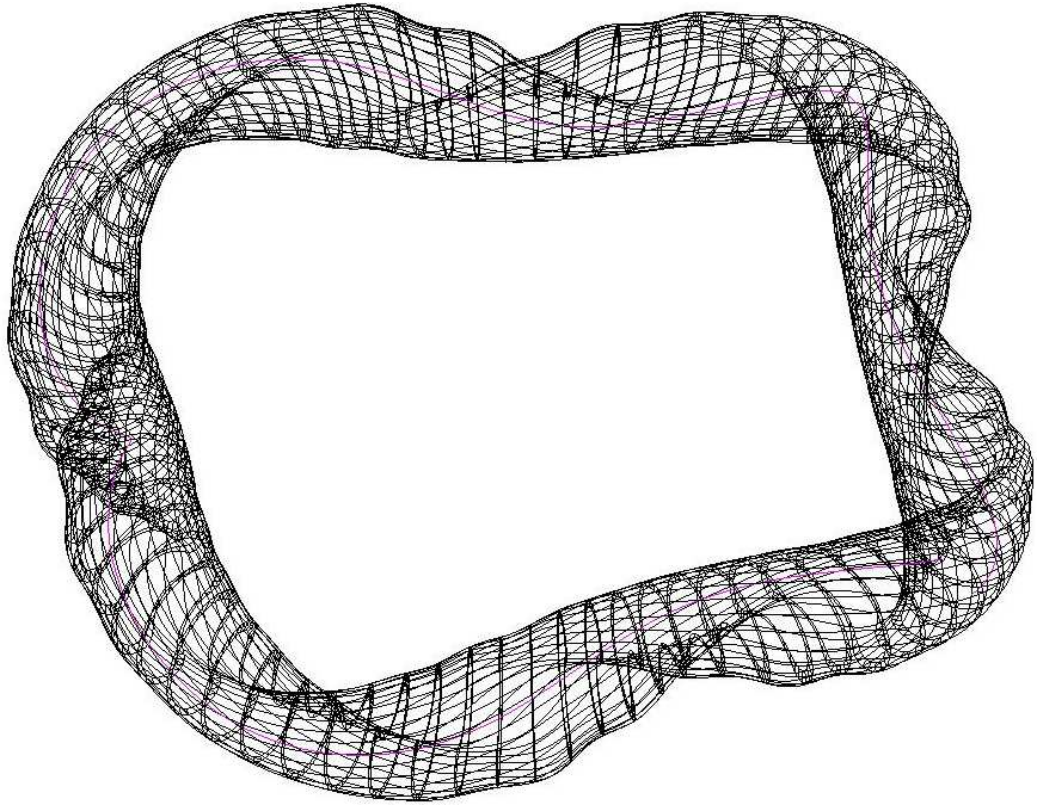


Figura 5.5: Mallado de la corona exterior y línea de campo (en magenta) para el caso ECH.

muy significativo al pasar de 6 a 8 modos. Un estudio más riguroso de la convergencia se deja para el futuro (ver último apartado).

Interpretando los resultados obtenidos en $[N_\beta, N_\lambda]=[4, 10]$ sin campo eléctrico, tanto el flujo de calor como el de partículas es un orden de magnitud superior para los iones que para los electrones en el caso NBI. En el caso ECH el flujo de partículas iónico es mayor que el electrónico, pero sin embargo el flujo de calor es del mismo orden en ambas especies.

5.4. Influencia del campo eléctrico radial

Otra cuestión interesante es comprobar el comportamiento de los flujos frente a variaciones del campo eléctrico radial E_r . En el estado actual del

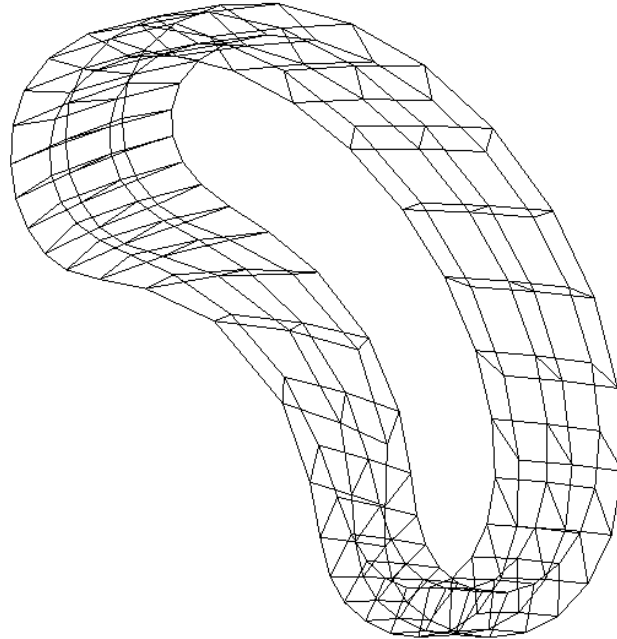


Figura 5.6: Detalle de mallado ECH (sección de corona exterior).

código, dicho campo se fija desde el exterior, pero no resulta difícil añadir un bucle que, iterativamente, busque la solución estacionaria en la que los flujos sean ambipolares. En todo caso es interesante obtener una idea del comportamiento, motivo por el que se han efectuado simulaciones con diferentes campos eléctricos para ver la tendencia de los flujos en función de E_r . Se han usado los perfiles de potencial de la figura 5.9 basados en descargas NBI y ECH experimentales. Se toman dos perfiles por cada tipo de descarga para visualizar la sensibilidad de los flujos radiales frente a las variaciones del campo eléctrico. Es de esperar que, usando un campo eléctrico más próximo al experimental se produzca un acercamiento entre los flujos de electrones e iones con respecto al caso sin campo eléctrico.

El comportamiento de los flujos bajo la acción de los potenciales electrostáticos ECH1 y ECH2 en las descargas del tipo ECH se muestra en la figura 5.10. En el caso de NBI se toman los potenciales NBI1 y NBI2 y los resultados se muestran en la figura 5.11 para simulaciones con $N_\beta=4$ y $N_\lambda=8$. En efecto, en ambos casos se aprecia la tendencia de los potenciales a igualar los flujos de iones y electrones. El flujo de electrones es más insensible ante

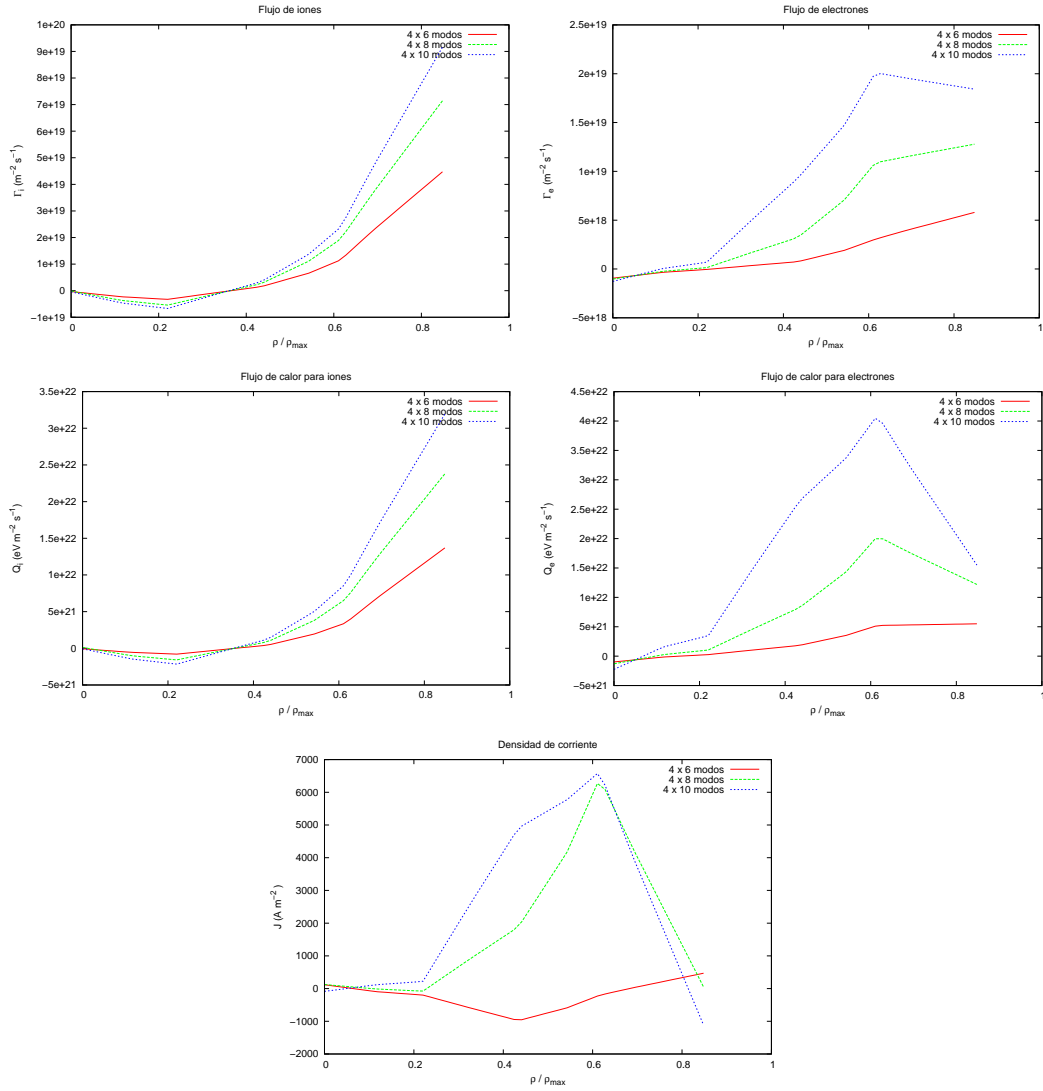


Figura 5.7: Flujos radiales de partículas (arriba) y calor (centro); y densidad de corriente (abajo) para descargas del tipo ECH. En cada caso se muestran resultados con $[N_\beta, N_\lambda]=[4, 6]$, $[4, 8]$ y $[4, 10]$ modos en velocidad. Notar la diferencia de escalas entre iones y electrones.

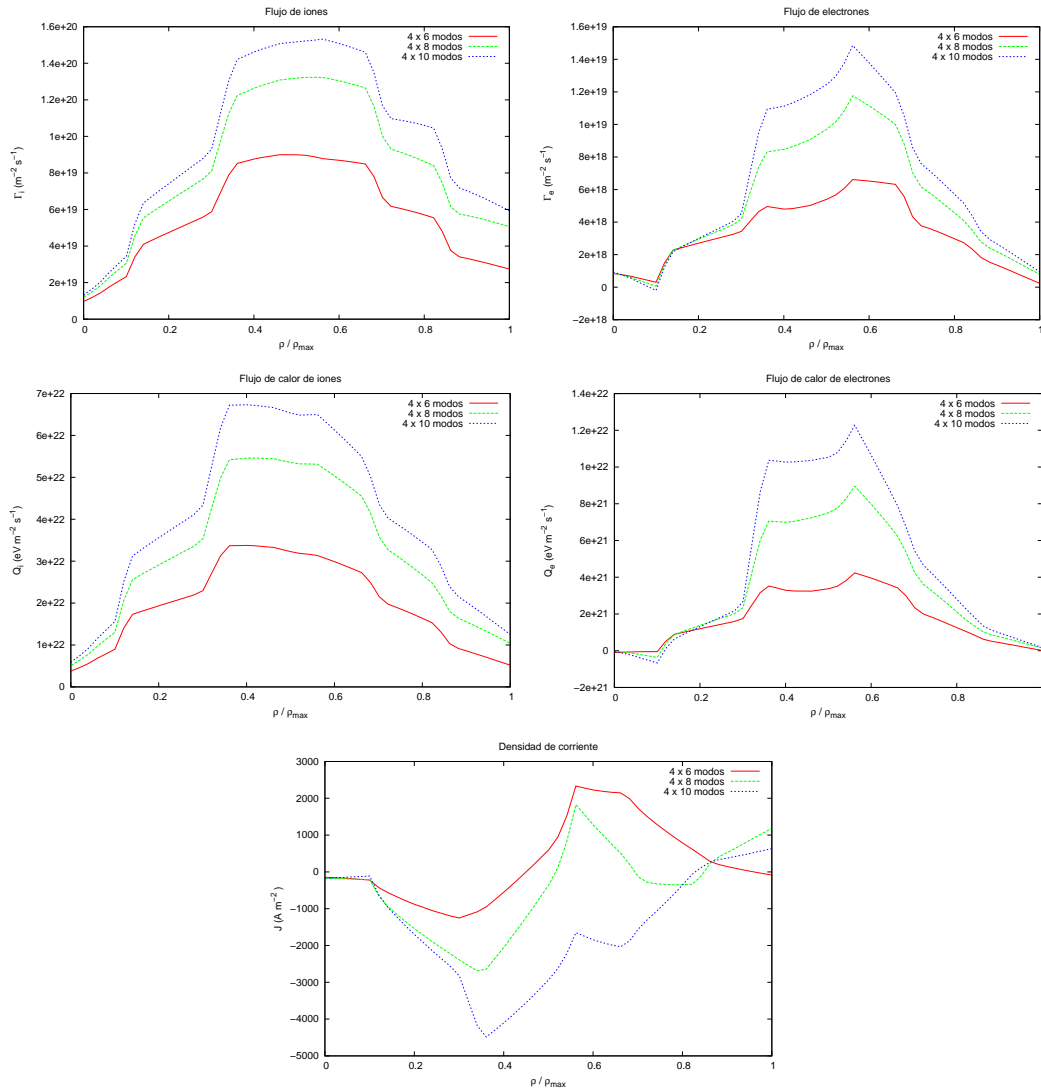


Figura 5.8: Flujos radiales de partículas (arriba) y calor (centro); y densidad de corriente (abajo) para descargas del tipo NBI. En cada caso se muestran resultados con $[N_\beta, N_\lambda]=[4, 6]$, $[4, 8]$ y $[4, 10]$ modos en velocidad.

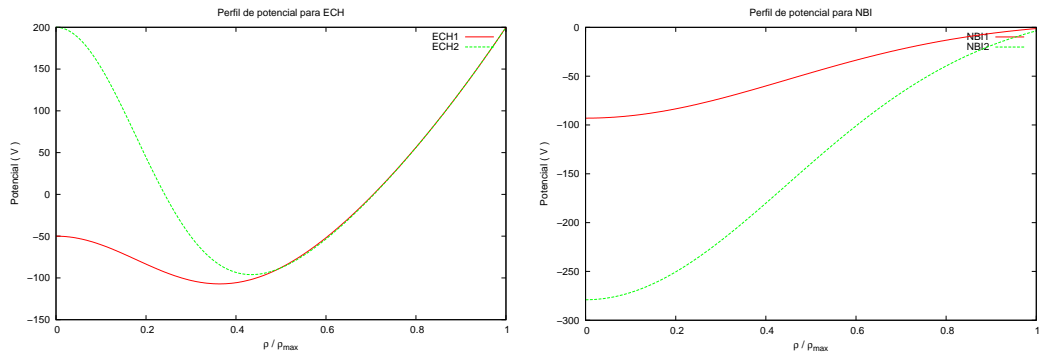


Figura 5.9: A la izquierda, dos perfiles radiales de potencial electrostático denominados ECH1 y ECH2 para descargas del tipo ECH. A la derecha se muestran otros dos (NBI1 y NBI2) para las descargas del tipo NBI.

la presencia del potencial que el iónico.

Ya que el transporte se está calculando de modo local, es inmediato determinar el punto radial en el que el campo eléctrico es nulo: allá donde, en la simulación sin campo eléctrico alguno, el flujo es ambipolar. Comparando las gráficas de flujos de partículas para iones y electrones en la descarga ECH, este punto se encuentra cerca de $\rho/\rho_{max} = 0,4$, coincidiendo aceptablemente bien con la zona en la que el potencial electrostático extraído de los experimentos presenta pendiente nula, lo cual se corresponde con $E_r = 0$. En el caso de NBI (de nuevo en la curva correspondiente a campo eléctrico nulo) los flujos de partículas de iones y electrones no se cruzan en el interior del plasma, lo cual se corresponde con la ausencia de extremos en el potencial electrostático, tal y como muestra en los datos experimentales. En cambio, cuando el campo es NBI1 se ve que existe ambipolaridad en torno a $\rho/\rho_{max} = 0,5$, que se corresponde con un campo $E_r \sim 2,5$ kV/m, lo cual es razonable si nos atenemos a los valores experimentales [12]. En el caso de la corriente eléctrica, se hace necesario un número mayor de modos en velocidad para hacer siquiera un estudio cualitativo de los perfiles y, por tanto, se muestran las figuras sólo con propósitos documentales. Como se ha visto en la sección precedente, la corriente es una magnitud que no ha llegado a converger pero, en todo caso, su valor integrado resulta del orden del kA, lo cual es también comparable a los valores experimentales.

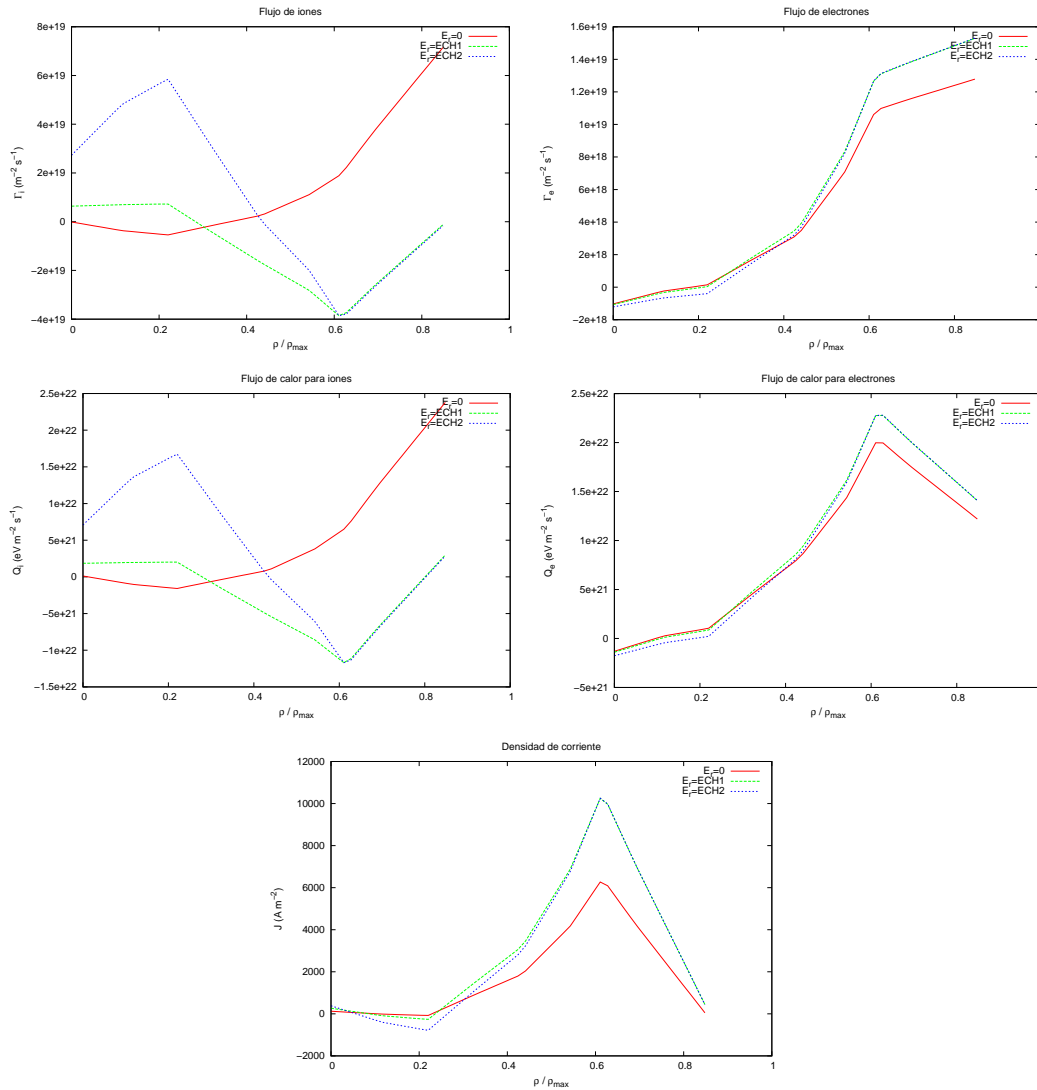


Figura 5.10: Flujos radiales de partículas (arriba) calor (mitad) y corriente (abajo) para descargas del tipo ECH. En cada caso se muestran resultados con $[N_\beta, N_\lambda]=[4, 6]$, $[4, 8]$ y $[4, 10]$ modos en velocidad

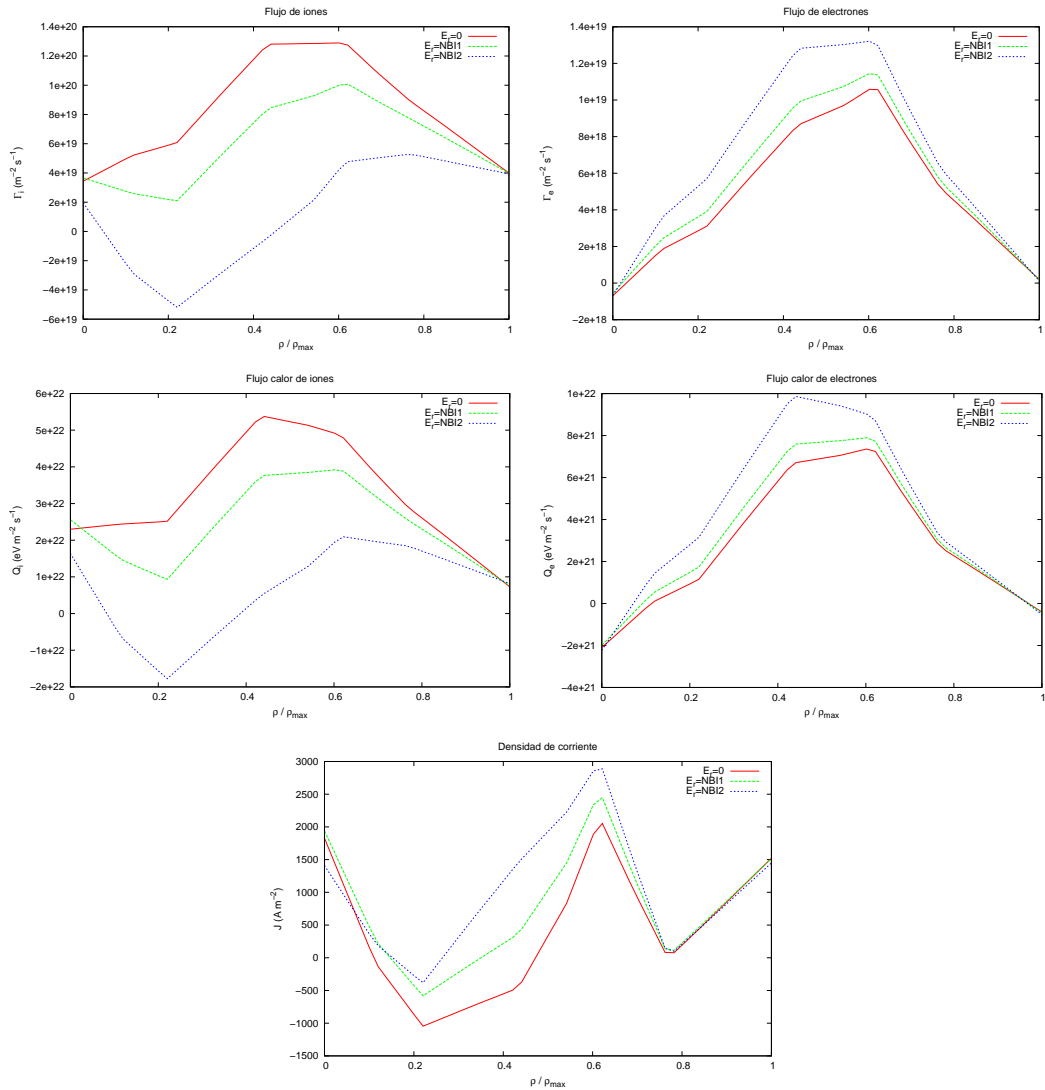


Figura 5.11: Flujos radiales de partículas (arriba) y calor (centro); y densidad corriente (abajo) para descargas del tipo NBI. En cada caso se muestran resultados con $[N_\beta, N_\lambda]=[4, 6]$, $[4, 8]$ y $[4, 10]$ modos en velocidad.

5.5. Resultados 3D

Por último, es interesante estudiar algunas figuras que muestren cantidades tridimensionales. Y es que una de las claves del código es su capacidad para obtener medidas precisas en el espacio 5D. En un principio podría pensarse que para alcanzar precisión numérica en los resultados espaciales hace falta mucha más finura en el cálculo (tanto en la malla como en el número de modos) que en el caso de los perfiles, pero ocurre justamente lo contrario: Los perfiles requieren una discretización muy precisa porque surgen como promedio de los flujos o corrientes tridimensionales, que presentan grandes variaciones locales. La ligera no cancelación de los flujos o corrientes al integrar en una corona de plasma da lugar a promedios pequeños pero no nulos, y es por ello que se requiere una alta precisión. Sin embargo, si lo interesante son las propiedades puramente 3D, el número de modos en velocidad y elementos de malla necesarios puede ser muy inferior al del estudio de perfiles. Como el método es continuo y carece de estadística, no afecta el hecho de tomar un solo punto espacial. Los códigos de partículas lo tienen más difícil aquí porque, si se quiere un valor local en el espacio, hay que llevar a cabo simulaciones masivas que garanticen un mínimo de estadística en el entorno del punto requerido.

En las figuras 5.12 y 5.13 se muestra la variación de temperatura iónica dentro de una superficie magnética cercana al borde. Recuérdese que, si bien se fijan los perfiles de densidad y temperatura en las simulaciones, se hace sólo sobre su valor promedio. Las máximas variaciones mostradas en las figuras se sitúan entre el $\pm 1\%$ cerca del eje y el $\pm 10\%$ en el borde. Más allá de los datos concretos de la simulación es interesante ver que, cerca del borde, las bobinas toroidales actúan como espejos magnéticos locales que introducen propiedades cinéticas en la función de distribución. Además, también influye la mayor intensidad de campo magnético en la zona próxima al *hard core*. El resultado es una pequeña variación de la temperatura dentro de la superficie magnética. Un fenómeno parecido se encuentra en las anisotropías en la temperatura, es decir, en las diferencias entre las temperaturas paralela y perpendicular.

Otro ejemplo de la capacidad de esta herramienta para poder estudiar propiedades tridimensionales en modos de la función de distribución es la figura 5.15. En ella se muestra la velocidad toroidal iónica para un caso ECH sin campo eléctrico (simulación con 4 x 8 modos en velocidad) usando simetría de 4 periodos. Los datos muestran una superficie magnética cerca de

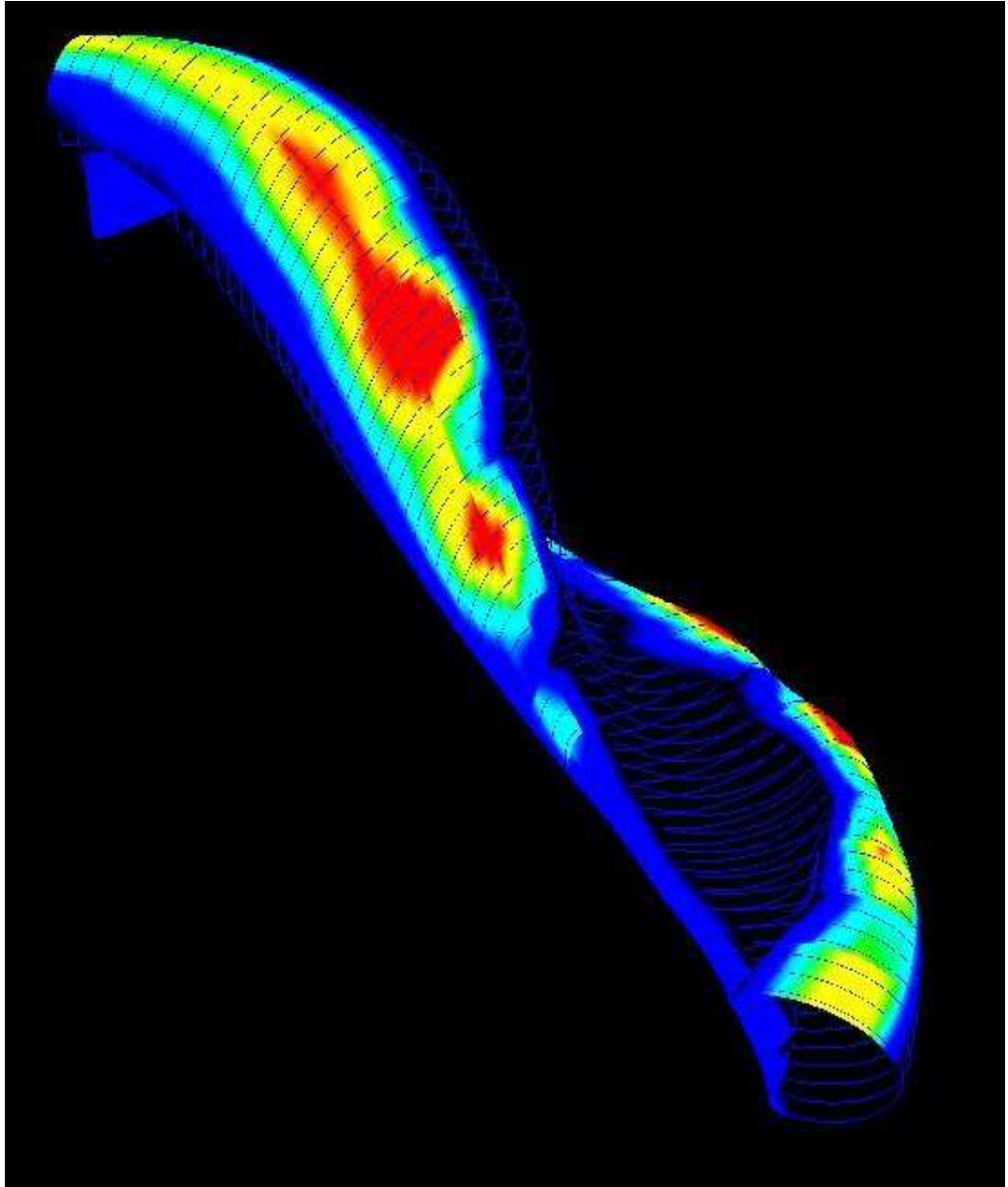


Figura 5.12: Anisotropía en temperatura iónica. Se muestra el valor del modo $C_{1,0}$ en velocidad, proporcional a la perturbación en temperatura (ver Ec. 2.52). Valores rojos son altos y azules bajos (solo se muestran los valores positivos).

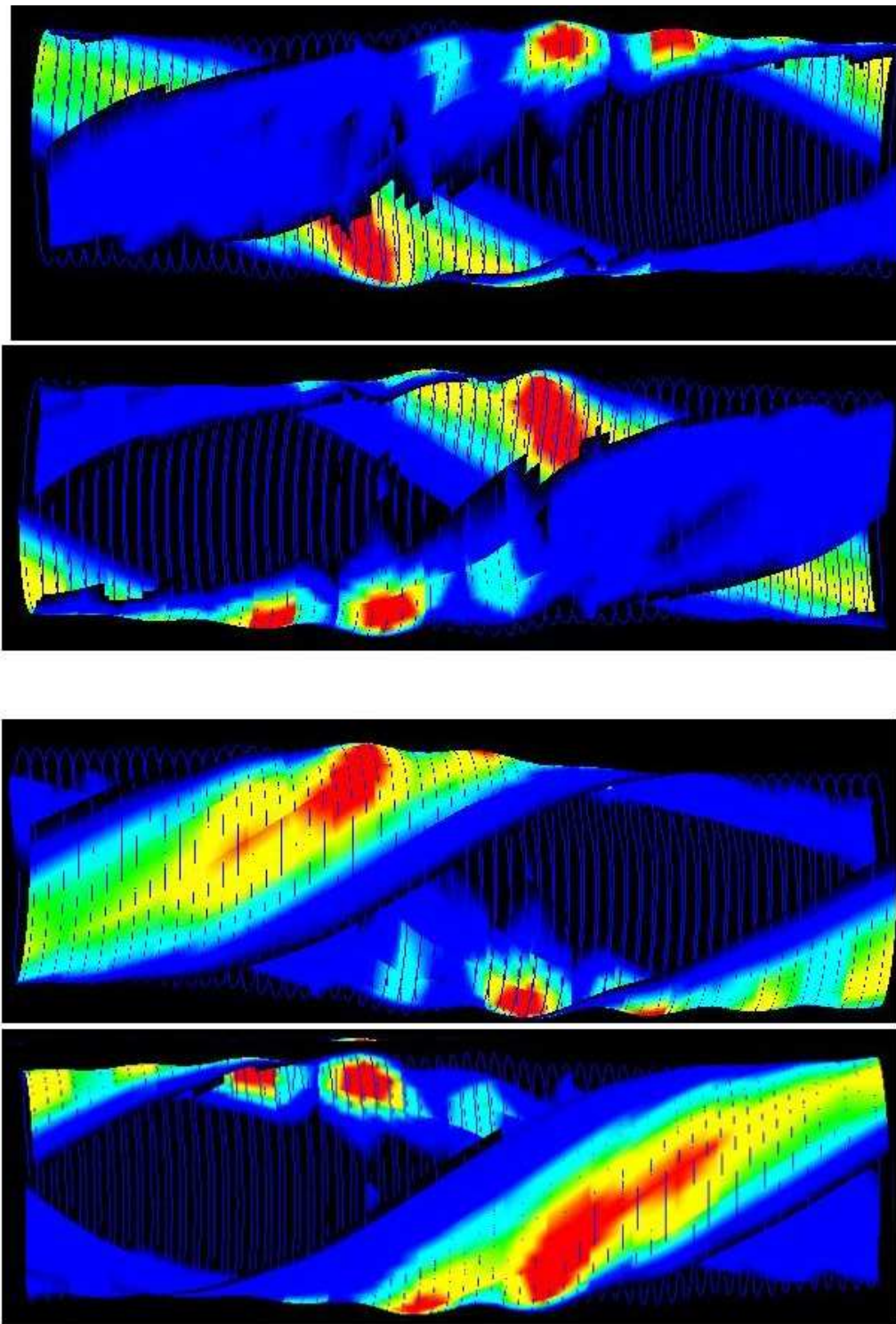


Figura 5.13: Otra representación de los datos de la figura 5.12 en coordenadas helicoidales (en todos los casos rojo indica un valor alto y azul uno bajo). De arriba a abajo: vista desde el *hard core* de valores positivos, vista desde el *hard core* de valores negativos, vista posterior de valores positivos, vista posterior de valores negativos. Se aprecia la simetría entre valores positivos/negativos, que refleja la simetría de la máquina.

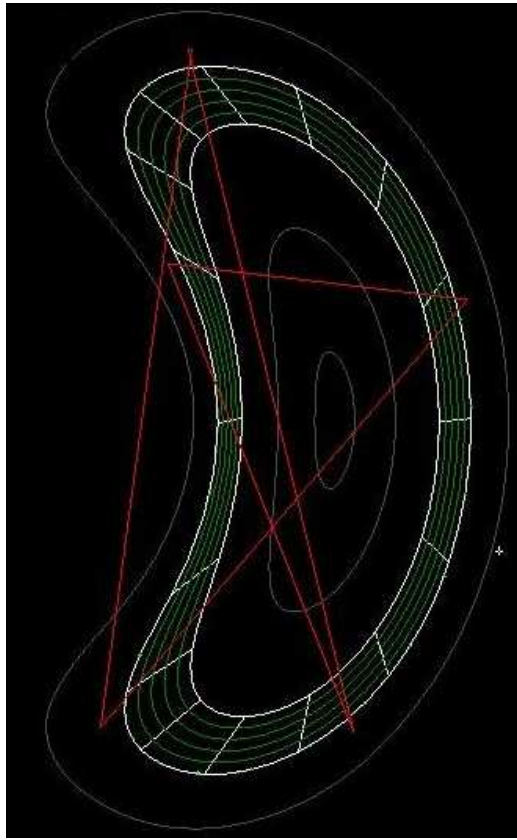


Figura 5.14: Sección del plasma donde se muestran los puntos del mapa de Poincaré (unidos por líneas rojas) correspondientes a 5 vueltas toroidales de la línea de campo al dispositivo. Esto se corresponde con el valor racional $8/5$ de la transformada rotacional

la racional $8/5$ (figura 5.14). Se observa una serie de “tubos” en la velocidad iónica que se corresponden con los pasos de la racional. Algo a estudiar es si la aparición de este fenómeno es estrictamente numérica (por la discretización del campo magnético) o subyace un principio físico. El comportamiento se repite para electrones pero con velocidad de signo opuesto dando lugar, junto a los iones, a una corriente eléctrica. En caso de haber un principio físico detrás, el campo magnético generado por la corriente podría alterar significativamente el campo en las proximidades de la racional.

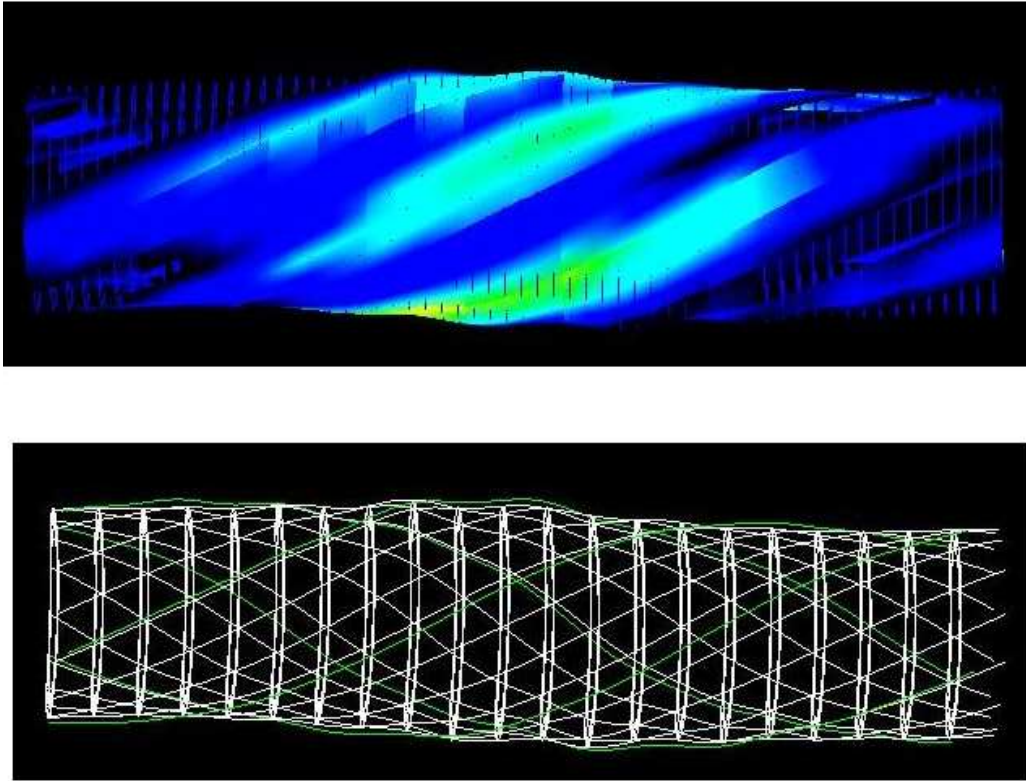


Figura 5.15: Superficie magnética cercana a la racional $8/5$ en coordenadas helicoidales. Arriba se muestra el valor de la corriente y abajo la estructura de malla con algunas líneas de campo magnético (en verde) correspondientes a la racional. Se puede apreciar la correspondencia entre los tubos de corriente y las líneas de campo.

5.6. Trabajo futuro

Como se indicó en la introducción, el objetivo principal de este capítulo no es tanto obtener resultados físicamente relevantes como mostrar que el código permite estudiar geometrías tan complejas como la del TJ-II. Las simulaciones mostradas en los anteriores apartados requirieron cada una 3–6 días de simulación en 24 procesadores con memoria compartida (ver apéndice C). El grueso de la computación se reduce a invertir una matriz cada paso temporal ficticio para alcanzar un estado estacionario (ver capítulo 3). Por tanto, el paso siguiente para ejecutar simulaciones interesantes en el TJ-II

de forma rutinaria consistiría en conseguir una inversión más rápida, o una eficiencia de paralelización mejor (que permita más de 100 procesadores con alta eficiencia, ver apéndice C). A pesar de quedar fuera de la tesis dicha fase del desarrollo del código, se ha querido incluir el apéndice B, donde se dan algunas ideas (no desarrolladas aún) sobre cómo hacerlo posible. A partir de ahí es posible llevar a cabo, para el TJ-II y otros *stellarators*, estudios mucho más rigurosos de convergencia que darían paso a la explotación del código. Una propuesta de estudios consecutivos es:

- Cálculo del campo eléctrico radial autoconsistente que obligue a la ambipolaridad.
- Importancia de los términos habitualmente despreciados al suponer el transporte radial difusivo (es decir, resolver la ecuación 4.19 en lugar de la 4.27).
- Incidencia de las inhomogeneidades del potencial dentro de una superficie de flujo, caracterizadas por ϕ_1 , sobre el transporte (ver capítulo 3).
- Evaluación de la corriente bootstrap en descargas ECH y NBI.
- Efectos de β sobre la configuración magnética y sobre el transporte.
- Estudio de efectos tridimensionales: variaciones de cantidades dentro de superficies magnéticas, islas, efecto de la corriente en la configuración magnética, etc.

Referencias

- [1] C. Alejaldre *et al.*, *TJ-II Project: A flexible Helic Stellerator*, Fusion Technol. **17**, 131 (1990).
- [2] A. López-Fraguas, D. López-Bruna y J. A. Romero: *Cálculo del Potencial Magnético Vector en el TJ-II*, Informe CIEMAT 1055, Abril (2005).
- [3] J.A. Romero, D. López-Bruna, A. López-Fraguas, R. Jiménez-Gómez, E. Ascasíbar, T. Estrada, R. Carrasco, L. Pacios, A. de la Peña, F. Lapayese, *A flux control tool to perform single discharge magnetic configuration sweeping at the TJ-II heliac*, 36th EPS Conference on Plasma Physics, Sofia (Bulgaria), June 29 - July 3 (2009).
- [4] C. Alejaldre, J. J. Alonso, J. Botija, F. Castejón, J. R. Cepero, J. Guasp, A. López-Fraguas, L. García, V. I. Krivenski, R. Martín, A. P. Navarro, A. Perea, A. Rodríguez-Yunta, M. Sorolla and A. Varias, *TJ-II Project: A flexible Helic Stellerator*. Fusion Technol. **17**, 131 (1990).
- [5] D. A. Hartmann, *Stellarators*, Trans. Fusion Sci. Tech. **45** 64, (2004).
- [6] M. Liniers and J. Alonso, *Neutral beam injection system for TJ-II*, Fusion Technol. **1** 307, (1998).
- [7] V Tribaldos, J A Jiménez, J Guasp, B Ph van Milligen, *Electron cyclotron heating and current drive in the TJ-II stellarator*, Plasma Phys. Control. Fusion **40** 2113 (1998).
- [8] J L. Velasco, F. Castejón, A. Tarancón, *Finite orbit width effect in ion collisional transport in TJ-II*, Phys. Plasmas, **16** 052303 (2009).
- [9] V. Tribaldos, J. Guasp, *Neoclassical global flux simulations in stellarators*, Plasma Phys. Control. Fusion, **47** 545 (2005).

- [10] B.P. van Milligen et al., *Ballistic transport phenomena in TJ-II*, Nucl. Fusion **42** 787 (2002).
- [11] V. Tribaldos *Monte Carlo estimation of neoclassical transport for the TJ-II stellarator*, Phys. Plasmas **8** 1229 (2001).
- [12] A. V. Melnikov et al., *Plasma potential evolution study by HIBP diagnostic during NBI experiments in the TJ-II stellarator*, Fusion Sci. Technol. **51** 31 (2007).

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se ha presentado un código de transporte en plasmas toroidales con los propósitos de (i) que sirva de nexo entre teoría y simulaciones complejas, y (ii) que ayude por tanto a la explicación cuantitativa de los resultados experimentales en la investigación de los plasmas de fusión por confinamiento magnético. Este código es capaz de resolver escalas de tiempos del transporte permitiendo obtener estados estacionarios compatibles con las fuentes de calor y partículas. Además, la geometría magnética abarca desde los casos axisimétricos típicos de los *tokamak* hasta los de máquinas tan complejas al respecto como el TJ-II. El código es capaz de describir el transporte neoclásico en estas condiciones, pero su diseño no excluye la inclusión de fenómenos de turbulencia en un futuro.

El transporte se describe resolviendo la función de distribución de una o varias especies del plasma en geometría toroidal arbitraria y hallando los correspondientes momentos. Las aproximaciones esenciales de partida son que: (i) se considera la dinámica de los *centros guía* de las partículas; y (ii) el campo magnético no evoluciona o lo hace con suficiente lentitud. La primera aproximación limita el uso a los fenómenos de escala espacial mayor que el radio de Larmor de las especies de partículas consideradas.

Se ha descrito el modelo teórico manteniendo un paralelismo con la teoría neoclásica, para no perder de vista la procedencia de los términos ni su significado. La función de distribución se desarrolla en torno a una maxwelliana usando polinomios clásicos para la parte cinética, de manera que es inmediata la obtención de los sucesivos momentos de la función de distribución –es decir, las cantidades macroscópicas de interés– usando cuadraturas. El esquema numérico del código es localmente conservativo. De momento no se resuelve

una ecuación de Poisson para tratar campos eléctricos autoconsistentes, si bien se ha elegido un método de cálculo que admite esta posibilidad.

En cuanto a la geometría espacial, basta con tener una descripción del campo magnético para, a través de otra herramienta de software desarrollada, obtener las correspondientes mallas adaptadas a la geometría concreta de modo tal que la malla siga lo mejor posible las líneas de \mathbf{B} . Esto es importante para minimizar la difusividad numérica radial debida a la fuerte convección paralela.

La codificación del modelo (mediante lenguajes C/C++) y su paralelización presenta una buena eficiencia con hasta 40 procesadores. La extensión a más procesadores sin perder eficiencia se muestra plausible mediante técnicas que serán incorporadas en el futuro (ver final de este capítulo).

Una vez implementado el código, se han particularizado el modelo y las simulaciones al caso de un *tokamak* axisimétrico, para poder comparar con la teoría existente. Después de hacer algunas pruebas de convergencia numérica, los cálculos muestran buen acuerdo con la teoría neoclásica.

Las simulaciones en el caso del TJ-II muestran la prometedora capacidad del código para abordar geometrías complejas de forma rutinaria.

La presente tesis ha servido tanto para tomar experiencia en el complejo mundo de la física de plasmas y su simulación, como para ofrecer una herramienta útil a la comunidad científica. De hecho, inmediatamente se podrían comenzar las siguientes líneas de investigación:

- Obtención del campo eléctrico radial autoconsistente: básico para estudiar correctamente los estados estacionarios.
- Estudio de corrientes toroidales: existen pocas herramientas que ofrezcan la capacidad de calcular las corrientes en máquinas complejas.
- Efectos de las excursiones radiales de los centros guía sobre el transporte: la opción de tener en cuenta este efecto está ya implementada en el código, por lo que sería interesante estudiar su importancia en casos tales como TJ-II.
- Influencia de racionales o islas sobre el transporte: estudiar en qué casos mejora y en cuales empeora el confinamiento.
- Comparaciones con otros códigos.

- Extensión a otras geometrías: Wendelstein 7-X, LHD, ITER, etc.
- Acelerar la búsqueda de soluciones estacionarias: mejorando el tiempo de computación de inversión de las matrices correspondientes al avance temporal (ver apéndice B).

Apéndice A

Tratamiento de la ecuación de deriva

En el capítulo 2 se obtuvo la ecuación que rige la dinámica de las diferentes especies (ver Ec. 2.15). No obstante, el resolver directamente dicha expresión no es lo convencional, pues los regímenes de trabajo habituales en fusión permiten simplificarla, algo ya comentado en la sección 4.2. Este apéndice muestra unos desarrollos más explícitos, y también más cercanos a las ecuaciones implementadas en el código, de la ecuación de evolución. Se redistribuirán términos en función de su procedencia y propiedades. Por último, una vez expandidos todos los términos se llevará a cabo la misma simplificación explicada en 4.2. El objetivo del apéndice es adentrarse lo máximo posible en las ecuaciones *realmente* codificadas.

A.1. Ecuación de evolución desarrollada

En el código se trabaja en variables (\mathbf{x}, v, λ) en lugar de $(\mathbf{r}, \beta, \lambda)$, de modo que la Ec. 2.15 se convierte en

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_{gc} f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{d\lambda}{dt} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{dv^2}{dt} v f \right) = C(f, f).$$

Separando la dinámica del centro guía en tres componentes asociadas al transporte paralelo (\parallel), a las derivas (D) y al campo eléctrico paralelo (E_{\parallel}) se

obtiene¹

$$\begin{aligned}
& \nabla \cdot (\mathbf{v}_{gc} f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{d\lambda}{dt} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{dv^2}{dt} v f \right) = \\
& \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\parallel} f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f \right) \\
& \nabla \cdot (\mathbf{v}_D f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f \right) \\
& \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f \right), \tag{A.1}
\end{aligned}$$

donde:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_{\parallel} &= v \lambda \mathbf{b} \\
\mathbf{v}_D &= \alpha_1 v^2 (1 + \lambda^2) \frac{m \mathbf{B} \times \nabla B}{q 2B^3} + \alpha_2 \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \\
\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} &= -v(1 - \lambda^2) \frac{\mathbf{b} \cdot \nabla B}{2B} \\
\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} &= \frac{1 - \lambda^2}{v} \frac{q}{m} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} \\
\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D &= \\
&+ \alpha_1 \alpha_2 \frac{1}{2} \lambda (1 - \lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} \\
\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} &= 0 \\
\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} &= \frac{2q}{m} v \lambda \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} \\
\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D &= \alpha_1 \alpha_2 v^2 (1 + \lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E}
\end{aligned}$$

¹Los términos asociados al rotacional de \mathbf{B} no se tienen cuenta por ser de segundo orden en plasmas de baja β (ver 4.2.2).

siendo α_1, α_2 constantes de valor unidad indicadoras de a qué derivas están asociados los términos. Así por ejemplo, si en un término aparece α_1 , forma parte de la deriva de curvatura por gradiente del campo. En el caso de ser α_2 se estaría hablando de la deriva eléctrica. Estas constantes tan solo se muestran como traza de a qué deriva está asociado cada término y no tienen ningún significado físico.

En el apartado A.3 se comprueba que las diferentes partes en (A.1) cumplen por separado:

-El primer término

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\parallel} f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f \right) = \\ \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} \frac{1}{2v} \frac{\partial f}{\partial v} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

-El segundo

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{v}_D f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f \right) = \\ \mathbf{v}_D \cdot \nabla f + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D \frac{1}{2v} \frac{\partial f}{\partial v} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

-Y el tercero

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f \right) = \\ \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} \frac{1}{2v} \frac{\partial f}{\partial v}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

que, en conjunto, demuestran la equivalencia entre las Ecs. 2.3 y 2.4 como corresponde a que la ecuación de centro guía procede de un Hamiltoniano.

Por otro lado, la FdD puede escindirse en dos términos: una parte que supondrá un fondo fijado maxwelliano (más adelante se verá su expresión explícita) y otra la perturbación²:

$$f(\rho, \theta, \phi, v, \lambda, t) = f_0(\rho, v) + f_1(\rho, \theta, \phi, v, \lambda, t)$$

²Esto no significa una aproximación mientras no se eliminen términos.

siendo (ρ, θ, ϕ) unas coordenadas magnéticas predeterminadas³. f_0 se supone homogénea en superficies de flujo y constante en el tiempo. Observar que la expansión de f es diferente que la presentada en el capítulo 4: mientras que allí se hacía una expansión en infinitos términos, aquí solo hay dos.

Ahora la Ec. A.1 puede expresarse del siguiente modo

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f_{0a}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\parallel} f_{0a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f_{0a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f_{0a} \right) + \\
& \frac{\partial f_{1a}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\parallel} f_{1a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f_{1a} \right) + \\
& \nabla \cdot (\mathbf{v}_D f_{0a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f_{0a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f_{0a} \right) + \\
& \nabla \cdot (\mathbf{v}_D f_{1a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f_{1a} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f_{0a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f_{0a} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f_{1a} \right) + \\
& = \sum_b C(f_{0a}, f_{0b}) + \sum_b C(f_{1a}, f_{0b}) + \sum_b C(f_{0a}, f_{1b}) + \sum_b C(f_{1a}, f_{1b}),
\end{aligned}$$

donde los subíndices a y b se refieren a la especie tratada (iones o electrones). Teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f_{0a}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\parallel} f_{0a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f_{0a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f_0 \right) = \\
& \frac{\partial f_{0a}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f_{0a} + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} \frac{\partial f_{0a}}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} \frac{1}{2v} \frac{\partial f_{0a}}{\partial v},
\end{aligned}$$

³En caso de no existir superficies magnéticas, se tomará un campo aproximado en que sí las haya. De nuevo es necesario especificar que esto *no* es una aproximación: como f_0 es solo parte de la función de distribución se puede tomar cualquier valor arbitrario siempre que no se cancele ningún término.

se puede reescribir

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f_{0a}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f_{0a} + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} \frac{\partial f_{0a}}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} \frac{1}{2v} \frac{\partial f_{0a}}{\partial v} + \\
& \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f_{0a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f_{0a} \right) + \\
& \nabla (\mathbf{v}_D f_{0a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f_{0a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f_{0a} \right) + \\
& \frac{\partial f_{1a}}{\partial t} + \nabla (\mathbf{v}_{\parallel} f_{1a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f_{1a} \right) + \\
& \nabla (\mathbf{v}_D f_{1a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f_{1a} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f_{1a} \right) + \\
& = \sum_b C(f_{0a}, f_{0b}) + \sum_b C(f_{1a}, f_{0b}) + \sum_b C(f_{0a}, f_{1b}) + \sum_b C(f_{1a}, f_{1b}). \quad (\text{A.5})
\end{aligned}$$

Tomando como solución para f_{0a} una función maxwelliana

$$f_{0a} = K_a e^{-(v/v_{ta})^2},$$

donde K_a y $v_{ta} = \sqrt{2T_{0a}/m_a}$ son constantes en el tiempo. Ahora puede cancelarse el primer término de (A.5) pues f_{0a} es, por definición, constante en el tiempo. Si existen superficies magnéticas, f_{0a} es constante en ellas y el segundo se cancelaría (no obstante por generalidad se dejará entre corchetes). Como f_{0a} es independiente de λ el tercer término se cancela. El cuarto es nulo por definición de $[dv^2/dt]_{\parallel}$.

Ahora (A.5) puede expresarse como

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f_{1a}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_{\parallel} f_{1a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f_{1a} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f_{0a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f_{0a} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \nabla \cdot (\mathbf{v}_D f_{1a}) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f_{1a} \right) + \\
& \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f_{1a} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f_{1a} \right) \\
& - \sum_b C(f_{1a}, f_{0b}) - \sum_b C(f_{0a}, f_{1b}) = \sum_b C(f_{0a}, f_{0b}) \\
& - \nabla \cdot (\mathbf{v}_D f_{0a}) - \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f_{0a} \right) - \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f_{0a} \right) - [\mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f_{0a}], \tag{A.6}
\end{aligned}$$

donde se ha tomado una aproximación al eliminar el término de colisiones no lineal $\sum_b C(f_{1a}, f_{1b})$ (esto es equivalente a trabajar con el operador de colisión linealizado). Usando de forma extensiva las propiedades (A.2), (A.3) y (A.4) se obtiene

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f_{1a}}{\partial t} + \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla (f_{1a}) + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} \frac{\partial f_{1a}}{\partial \lambda} - \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} \frac{m_a}{2T_{0a}} f_{0a} \\
& \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{1a} + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D \frac{\partial f_{1a}}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D \frac{1}{2v} \frac{\partial f_{1a}}{\partial v} + \\
& \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} \frac{\partial f_{1a}}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} \frac{1}{2v} \frac{\partial f_{1a}}{\partial v} \\
& - \sum_b C(f_{1a}, f_{0b}) - \sum_b C(f_{0a}, f_{1b}) = \sum_b C(f_{0a}, f_{0b}) \\
& - \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D \frac{m_a}{2T_{0a}} f_{0a} - [\mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f_{0a}], \tag{A.7}
\end{aligned}$$

donde se han pasado al miembro derecho las fuentes. Además, se ha tenido en cuenta que

$$\frac{1}{2v} \frac{\partial f_{0a}}{\partial v} = -\frac{1}{(v_{ta})^2} f_{0a} = -\frac{m_a}{2T_{0a}} f_{0a}.$$

Numéricamente se resolverá (A.6) pues es la más adecuada en términos de conservación. Por otro lado, la Ec. A.7 es más compleja que la original (A.1) pero es equivalente, salvo por el operador de colisión linealizado. En la nueva representación es fácil identificar los términos con los habituales en la literatura. Como ejemplo, se va a reducir al caso de transporte suponiendo

excursiones radiales pequeñas por los centros guía, utilizado en el capítulo 4 (y en la teoría neoclásica). No obstante *debe quedar claro que el código implementa las ecuaciones completas (A.6)*, aunque un caso particular de ellas sea el ejemplo que viene a continuación.

A.2. Ejemplo: Reducción a la ecuación de evolución para teoría Neoclásica

Siguiendo el argumento de la sección 4.2, sean los casos en que f_{1a} pueda considerarse de primer orden en ϵ frente a f_{0a} , que es de orden cero. Del mismo modo, las derivas son de primer orden frente al orden cero de la convección paralela. Entonces, regresando a (A.7), los términos cuadráticos en f_{1a} y los términos deriva de f_{1a} son considerados de segundo orden en ϵ y por tanto despreciables. Esto es así porque la ecuación de centro guía sólo es exacta en primer orden en ϵ , como ya se comentó en la introducción. Además, el término de colisión entre maxwellianas de diferentes especies $\sum_b C(f_{0a}, f_{0b})$ se supone despreciable (de nuevo se refiere al lector a 4.2). Por supuesto se presupone que existen superficies magnéticas y el término entre corchetes se anula. Así se puede reescribir

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_{1a}}{\partial t} + v\lambda \mathbf{b} \cdot \nabla f_{1a} + \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f_{1a} + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} \frac{\partial f_{1a}}{\partial \lambda} \\ & - v\lambda \mathbf{b} \cdot \nabla \phi \frac{q_a}{T_{0a}} f_{0a} - \sum_b C(f_{1a}, f_{0b}) - \sum_b C(f_{0a}, f_{1b}) = \\ & - \mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D \frac{m_a}{2T_{0a}} f_{0a}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Esto puede compararse directamente con la literatura de transporte neoclásico.

Con el potencial electrostático se lleva a cabo una separación similar en un fondo fijo y una parte de perturbación

$$\phi(\rho, \theta, \phi) = \phi_0(\rho) + \phi_1(\rho, \theta, \phi) \rightarrow \mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_1.$$

La componente $\phi_0(\rho)$ contendrá el campo radial promediado (homogéneo en las superficies de flujo) y $\phi_1(\rho, \theta, \phi)$, que será responsable de mantener la

ambipolaridad local dentro de cada superficie. Para ello, se agrupa dentro de una nueva función g_{1a} el potencial y la FdD [1, 2]

$$g_{1a} = f_{1a} - f_{0a} \frac{q_a}{T_{0a}} \phi_1.$$

Una vez sustituida g_{1a} , la ecuación de evolución (A.8) queda expresada ahora como ⁴

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{1a}}{\partial t} + v\lambda \mathbf{b} \cdot \nabla g_{1a} \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f_{1a} + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} \frac{\partial f_{1a}}{\partial \lambda} \\ - \sum_b C(g_{1a}, f_{0b}) - \sum_b C(f_{0a}, g_{1b}) = -\mathbf{v}_D \cdot \nabla f_{0a} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D \frac{m_a}{2T_{0a}} f_{0a}. \end{aligned}$$

Es fácil obtener f_{1a} y ϕ_1 a partir de la condición de ambipolaridad

$$\sum_a q_a n_{0a} = 0,$$

lo que equivale a

$$\sum_a \frac{q_a^2 n_{0a}}{T_{0a}} \phi_1 = \sum_a q_a \int g_{1a} d^3v.$$

A.3. Anexo: Términos conservativos en forma equivalente

De un lado se tiene

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_{gc} = v\lambda \nabla \cdot \mathbf{b} + v^2(1 + \lambda^2) \frac{m}{q} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{2B^3} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \right). \quad (\text{A.9})$$

Trabajando con el primer término

$$\nabla \cdot \mathbf{b} = \nabla \cdot \frac{\mathbf{B}}{B} = \frac{1}{B} \nabla \cdot \mathbf{B} + \mathbf{B} \cdot \nabla \left(\frac{1}{B} \right) = -\frac{\mathbf{B} \cdot \nabla B}{B^2}.$$

⁴Se ha eliminado el potencial electrostático ϕ_0 por ser homogéneo dentro de las superficies magnéticas, y por tanto con gradiente paralelo a \mathbf{b} nulo

En el segundo término

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{2B^3} \right) &= \nabla \left(\frac{1}{2B} \right) \cdot \left(\frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^2} \right) + \frac{1}{2B} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^2} \right) = \\ &- \left(\frac{\nabla B}{2B^2} \right) \cdot \left(\frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^2} \right) + \frac{1}{2B} \nabla \cdot \left(\nabla \times \mathbf{b} - \frac{\nabla \times \mathbf{B}}{B} \right) = -\frac{1}{2B} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \times \mathbf{B}}{B} \right) = 0. \end{aligned}$$

en el tercero:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \right) &= \frac{\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{B})}{B^2} + (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla \left(\frac{1}{B^2} \right) = \frac{\mathbf{B} \cdot \nabla \times \mathbf{E} - \mathbf{E} \cdot \nabla \times \mathbf{B}}{B^2} \\ &- 2(\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \cdot \left(\frac{\nabla B}{B^3} \right) = - \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \right) \cdot \frac{2\nabla B}{B}. \end{aligned}$$

Finalmente la ecuación A.9 se reduce a

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_{gc} = -v\lambda \frac{\mathbf{B} \cdot \nabla B}{B^2} - \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \right) \cdot \frac{2\nabla B}{B}. \quad (\text{A.10})$$

Realizando un procedimiento parecido con el término de fuerza asociado al *pitch*

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{d\lambda}{dt} \right) &= \\ \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(-v(1-\lambda^2) \frac{\mathbf{b} \cdot \nabla B}{2B} + \frac{1-\lambda^2}{v} \frac{q}{m} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{2} \lambda(1-\lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} \right) &= \\ v\lambda \frac{\mathbf{b} \cdot \nabla B}{B} - \frac{2\lambda}{v} \frac{q}{m} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{2} (1-3\lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} & \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

y el asociado a la velocidad:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{dv^2}{dt} v \right) &= \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{2q}{m} v^2 \lambda \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} + v^3 (1+\lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} \right) = \\ \frac{2q}{m} \lambda \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} + \frac{3}{2} (1+\lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} & \quad (\text{A.12}) \end{aligned}$$

Reuniendo los resultados parciales (A.10), (A.11) y (A.12)

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{d\lambda}{dt} \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{dv^2}{dt} v \right) = v\lambda \frac{\mathbf{b} \cdot \nabla B}{B} - \frac{2\lambda}{v} \frac{q}{m} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{2} (1-3\lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E}$$

$$+\frac{2\lambda}{v} \frac{q}{m} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} + \frac{3}{2}(1+\lambda^2) \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} = v\lambda \frac{\mathbf{b} \cdot \nabla B}{B} + 2 \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} \cdot \mathbf{E} = -\nabla \cdot \mathbf{v}_{gc}.$$

En resumen

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_{gc} + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right] f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right] v f \right) = 0,$$

donde es fácil seguir los términos y ver que cumplen por separado

$$\begin{aligned} \nabla (\mathbf{v}_{\parallel} f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} v f \right) = \\ \mathbf{v}_{\parallel} \cdot \nabla f + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{\parallel} \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{\parallel} \frac{1}{2v} \frac{\partial f}{\partial v} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nabla (\mathbf{v}_D f) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D v f \right) = \\ \mathbf{v}_D \cdot \nabla f + \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_D \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_D \frac{1}{2v} \frac{\partial f}{\partial v} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} f \right) + \frac{1}{2v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left(\left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} v f \right) = \\ \left[\frac{d\lambda}{dt} \right]_{E_{\parallel}} \frac{\partial f}{\partial \lambda} + \left[\frac{dv^2}{dt} \right]_{E_{\parallel}} \frac{1}{2v} \frac{\partial f}{\partial v}. \end{aligned}$$

Referencias

- [1] M. Taguchi, *Neoclassical heat flux due to poloidal electric field in arbitrary collisionality regime*, Plasma Phys. Control. Fusion **35**, 193 (1993)
- [2] E. A. Belli, J. Candy, *Kinetic calculation of neoclassical transport including self-consistent electron and impurity dynamics* Plasma Phys. Control. Fusion **50**, 095010 (2008).

Apéndice B

Método matricial para el desacoplo de modos

Las simulaciones llevadas a cabo para obtener resultados en esta tesis han sido ejecutadas sin preconditionador alguno, y ello limita la precisión de los resultados que se pueden obtener en un tiempo razonable. El obtener un preconditionador adecuado no es algo inmediato, y queda como siguiente paso a desarrollar en el futuro. No obstante, en este apéndice se ofrece una sugerencia de cómo se podría agilizar considerablemente la resolución del sistema de ecuaciones proveniente del avance temporal implícito para llegar a estacionarios. Incluso podría ser aplicado en otros ámbitos de simulación, algunos de los cuales se pincelarán.

El principio se basa en una sencilla técnica, pero no es común ver en la bibliografía detalles tan concretos de la resolución de matrices provenientes de simulaciones numéricas¹, por eso en este apéndice no se dan citas. No obstante, debido al sencillo principio subyacente, es probable que no sea algo nuevo.

En esencia, la idea consiste en aplicar un desarrollo matricial determinado a la matriz que debe ser invertida en cada paso implícito de avance temporal.

En primer lugar se mostrará la técnica aplicada a una matriz genérica (sección B.1). A continuación se definirá una nomenclatura y propiedades determinadas para matrices en bloque específicas, y se resolverán sistemas bajo dicha forma (sección B.2). Por último se aplica la técnica a la matriz

¹Por supuesto se podría hacer una búsqueda extensiva en todas las tesis y revistas escritas, pero no es ése el objetivo de esta tesis.

del sistema concreto del código presentado en esta tesis (sección B.3).

Este apéndice pretende ser más didáctico que riguroso en las demostraciones: un estudio pormenorizado se deja para el futuro.

B.1. Introducción

En esta sección se introducirán elementos claves de la técnica. A pesar de que para el ejemplo propuesto pueda parecer redundante y complejo, el objetivo es comprender algunas nociones previas.

Sean las matrices genéricas \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_2 y los escalares α_1 y α_2 . Supongamos que se quiere resolver un sistema lineal

$$(\alpha_1 \mathbf{A}_1 + \alpha_2 \mathbf{A}_2) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (\text{B.1})$$

con la particularidad de que deben hallarse soluciones para \mathbf{A}_1 y \mathbf{A}_2 fijas pero múltiples valores de α_1 y α_2 . Un ejemplo sería el caso de avance implícito en el tiempo donde $\alpha_i = \alpha_i(t)$. Llevando a cabo la descomposición espectral de \mathbf{A}_1 :

$$(\alpha_1 \Gamma_{\mathbf{A}_1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1} \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} + \alpha_2 \mathbf{A}_2)$$

donde $\Gamma_{\mathbf{A}}$ es la matriz de autovectores de \mathbf{A}_1 y $\lambda_{\mathbf{A}_1}$ la matriz diagonal formada por los autovalores de la misma². Continuando con el proceso:

$$\Gamma_{\mathbf{A}_1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1} \cdot (\alpha_1 \mathbf{I}_N + \alpha_2 \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \mathbf{A}_2 \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}) \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} \quad (\text{B.2})$$

donde \mathbf{I}_N es la matriz identidad. Sea ahora la descomposición espectral

$$\mathbf{B}_2 = \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \mathbf{A}_2 \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1} = \Gamma_{\mathbf{B}_2} \cdot \lambda_{\mathbf{B}_2} \cdot \Gamma_{\mathbf{B}_2}^{-1}$$

que, aplicado a la ecuación (B.2)

$$\Gamma_{\mathbf{A}_1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1} \cdot (\alpha_1 \mathbf{I}_N + \alpha_2 \Gamma_{\mathbf{B}_2} \cdot \lambda_{\mathbf{B}_2} \cdot \Gamma_{\mathbf{B}_2}^{-1}) \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} \quad (\text{B.3})$$

Gracias a que la identidad puede ser llevada a cualquier espacio de autovectores y permanece igual, (B.3) se puede expresar como

$$\Gamma_{\mathbf{A}_1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1} \cdot \Gamma_{\mathbf{B}_2} \cdot (\alpha_1 \mathbf{I}_N + \alpha_2 \lambda_{\mathbf{B}_2}) \cdot \Gamma_{\mathbf{B}_2}^{-1} \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1}$$

²De aquí en adelante y mientras que no se indique lo contrario, se supondrá que no existen autovalores nulos y, por tanto, todas las matrices que se citen son invertibles.

Introduciendo esta expresión en el sistema de ecuaciones original (B.1)

$$\Gamma_{\mathbf{A}_1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1} \cdot \Gamma_{\mathbf{B}_2} \cdot (\alpha_1 \mathbf{I}_N + \alpha_2 \lambda_{\mathbf{B}_2}) \cdot \Gamma_{\mathbf{B}_2}^{-1} \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

que puede representarse como

$$(\alpha_1 \mathbf{I}_N + \alpha_2 \lambda_{\mathbf{B}_2}) \cdot \mathbf{x}' = \mathbf{b}'$$

siendo

$$\mathbf{x}' = \Gamma_{\mathbf{B}_2}^{-1} \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \mathbf{x}$$

y

$$\mathbf{b}' = \Gamma_{\mathbf{B}_2}^{-1} \cdot \lambda_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \Gamma_{\mathbf{A}_1}^{-1} \cdot \mathbf{b}.$$

El detalle importante es que el sistema de ecuaciones a resolver para \mathbf{x}' es trivial, pues la matriz del sistema pasa a ser diagonal. Por lo tanto, todo el coste de resolver el sistema de este modo se centra en las descomposiciones espectrales necesarias, y los productos matriz-vector. La clave es que en dichas descomposiciones no entran los escalares α_i . De ahí la ventaja para los casos en que es necesario resolver el mismo sistema de ecuaciones para muchos valores de α_i .

B.2. Matrices en bloque

El siguiente paso para comprender el algoritmo, es suponer que la matriz del sistema está compuesta por multiplicación de matrices bloques con determinada estructura. Por ello se define una notación específica y ciertas propiedades de dichas matrices antes de pasar a ejemplos concretos.

B.2.1. Notación y propiedades

Sea \mathbf{A} una matriz cuadrada de orden $N \cdot M$ que puede ser descompuesta en el producto de otras dos

$$\mathbf{A} = [\alpha] \cdot [\mathbf{B}]$$

donde $[\alpha]$ y $[\mathbf{B}]$ son, de nuevo, dos matrices cuadradas³ de orden $N \cdot M$:

³A partir de ahora todas las matrices que se definan se supondrán cuadradas, salvo que se indique lo contrario, por lo que no se especificará más esta propiedad.

- Sea la estructura en bloques de una matriz del tipo $[\alpha]$ (caracterizada por los corchetes cerrados por arriba):

$$[\alpha] = \begin{bmatrix} \alpha & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \alpha \end{bmatrix}$$

donde α es una matriz genérica de orden N . El número de bloques diagonales es M .

- Mientras que las del tipo tipo $[\mathbf{B}]$ (caracterizada por los corchetes cerrados por abajo) están compuestas por los bloques:

$$[\mathbf{B}] = \begin{bmatrix} b_{1,1}\mathbf{I}_N & b_{1,2}\mathbf{I}_N & \cdots & b_{1,M}\mathbf{I}_N \\ b_{2,1}\mathbf{I}_N & b_{2,2}\mathbf{I}_N & \cdots & b_{2,M}\mathbf{I}_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{M,1}\mathbf{I}_N & b_{M,2}\mathbf{I}_N & \cdots & b_{M,M}\mathbf{I}_N \end{bmatrix}$$

donde \mathbf{I}_N representa a la matriz identidad de orden N y b_{ij} las componentes de una matriz genérica \mathbf{B} de orden M .

Por lo tanto:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_{1,1}\alpha & b_{1,2}\alpha & \cdots & b_{1,M}\alpha \\ b_{2,1}\alpha & b_{2,2}\alpha & \cdots & b_{2,M}\alpha \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{M,1}\alpha & b_{M,2}\alpha & \cdots & b_{M,M}\alpha \end{bmatrix}$$

Veamos ahora algunas propiedades que se utilizarán más adelante. Dadas las matrices genéricas α_1 α_2 y \mathbf{B} , es fácil verificar que

$$[\alpha_1 \cdot \alpha_2] = [\alpha_1] \cdot [\alpha_2] \quad (\text{B.4})$$

además de

$$[\alpha_1] + [\alpha_2] = [\alpha_1 + \alpha_2] \quad (\text{B.5})$$

y

$$[\alpha_1] \cdot [\mathbf{B}] = [\mathbf{B}] \cdot [\alpha_1] \quad (\text{B.6})$$

y por último

$$[\alpha_1]^{-1} = [\alpha_1^{-1}] \quad y \quad [\mathbf{B}]^{-1} = [\mathbf{B}^{-1}] \quad (\text{B.7})$$

Estas propiedades serán útiles más adelante.

B.2.2. Resolución de suma de matrices en bloque

Supongamos un sistema de ecuaciones del tipo

$$([\alpha_1] \cdot [\mathbf{B}_1] + [\alpha_2] \cdot [\mathbf{B}_2]) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (\text{B.8})$$

Puede parecer un caso muy particular, pero en realidad existen numerosas situaciones en las que un modelo físico ofrece esta forma. Un ejemplo se encuentra en las ecuaciones del problema de reacción-difusión [1] donde hay convección espacial entre M nodos y reacciones entre N especies. En dicho sistema de reacción-difusión el sistema vendría modelado por

$$([\mathbf{R}] \cdot [\mathbf{d}_M] + [\mathbf{d}_N] \cdot [\mathbf{D}]) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

donde \mathbf{R} es la matriz de orden N que caracteriza las reacciones entre especies, y \mathbf{D} es la discretización del operador de difusión entre los diferentes nodos en el espacio, caracterizado por una matriz de orden M. Por otro lado \mathbf{d}_N es una matriz diagonal de orden N que aplica determinado peso a las reacciones en cada nodo espacial y \mathbf{d}_M ofrece la posibilidad de aplicar diferentes constantes difusivas a las diferentes especies a través de otra matriz de orden M.

Otro ejemplo de problema prototipo se encuentra en los métodos que contienen discretizaciones espectrales en unas dimensiones y de elementos finitos o diferencias finitas en otras. En algunos casos sencillos podría expresarse de este modo igualmente.

Ahora es posible aplicar la técnica del apartado anterior para reducir el coste computacional del problema. Comenzamos por reescribir la matriz del sistema (B.8) como

$$[\alpha_1] \cdot [\mathbf{B}_1] + [\alpha_2] \cdot [\mathbf{B}_2] = [\mathbf{\Gamma}_{\alpha_1}] \cdot [\lambda_{\alpha_1}] \cdot [\mathbf{\Gamma}_{\alpha_1}^{-1}] \cdot [\mathbf{B}_1] + [\alpha_2] \cdot [\mathbf{B}_2]$$

donde se ha aplicado la descomposición espectral

$$\alpha_1 = \mathbf{\Gamma}_{\alpha_1} \cdot \lambda_{\alpha_1} \cdot \mathbf{\Gamma}_{\alpha_1}^{-1}$$

y la propiedad (B.4).

A continuación, aplicando extensivamente las propiedades (B.4),(B.6) y (B.7)

$$[\mathbf{\Gamma}_{\alpha_1} \lambda_{\alpha_1}] \cdot ([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{B}_1] + [\lambda_{\alpha_1}^{-1} \mathbf{\Gamma}_{\alpha_1}^{-1} \alpha_2 \mathbf{\Gamma}_{\alpha_1}] \cdot [\mathbf{B}_2]) \cdot [\mathbf{\Gamma}_{\alpha_1}^{-1}]. \quad (\text{B.9})$$

Sea la matriz β_2 y su descomposición espectral

$$\beta_2 = \lambda_{\alpha_1}^{-1} \cdot \Gamma_{\alpha_1}^{-1} \cdot \alpha_2 \cdot \Gamma_{\alpha_1} = \Gamma_{\beta_2} \cdot \lambda_{\beta_2} \cdot \Gamma_{\beta_2}^{-1}.$$

En tal caso, se aplica a (B.9) para obtener:

$$[\Gamma_{\alpha_1} \cdot \lambda_{\alpha_1}] \cdot ([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{B}_1] + [\Gamma_{\beta_2} \cdot \lambda_{\beta_2} \cdot \Gamma_{\beta_2}^{-1}] \cdot [\mathbf{B}_2]) \cdot [\Gamma_{\alpha_1}^{-1}]$$

que puede expresarse, usando de nuevo las propiedades (B.4) y (B.6) como

$$[\Gamma_{\alpha_1} \cdot \lambda_{\alpha_1} \cdot \Gamma_{\beta_2}] \cdot ([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{B}_1] + [\lambda_{\beta_2}] \cdot [\mathbf{B}_2]) \cdot [\Gamma_{\beta_2}^{-1} \cdot \Gamma_{\alpha_1}^{-1}]$$

donde se ha tenido en cuenta de nuevo que la identidad no varía ante cambios de sistemas de referencia a otro espacio de autovectores.

El sistema de ecuaciones inicial (B.8), por tanto, puede expresarse como

$$([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{B}_1] + [\lambda_{\beta_2}] \cdot [\mathbf{B}_2]) \cdot \mathbf{x}' = \mathbf{b}'$$

donde

$$\mathbf{x}' = [\Gamma_{\beta_2}^{-1} \cdot \Gamma_{\alpha_1}^{-1}] \cdot \mathbf{x}$$

y

$$\mathbf{b}' = ([\Gamma_{\beta_2}^{-1} \cdot \lambda_{\alpha_1}^{-1} \cdot \Gamma_{\alpha_1}^{-1}] \cdot \mathbf{b}.$$

Este largo desarrollo no es en vano pues en el sistema a resolver se ha desacoplado en N sistemas, pues las matrices del tipo $[\]$ son todas diagonales y las de tipo $[\]$, por construcción, están desacopladas (están compuestas a partir de identidades). Esto supone una ventaja enorme en la resolución numérica: por ejemplo el número de iteraciones de un método iterativo crece con el orden de la matriz y será mucho más eficiente en el caso de N submatrices de tamaño M que en una de $N \cdot M$.

Obsérvese también que en este caso no es necesario más de una resolución del sistema para aprovechar las bondades del método. Podría pensarse que el coste real se ha desplazado a la obtención de \mathbf{b}' a partir de \mathbf{b} y \mathbf{x} a partir de \mathbf{x}' puesto que es necesario invertir matrices y descomposiciones espectrales. Pero dichas inversiones de matrices de bloques se obtienen por repetición a partir de otras de tamaño N , con lo que el coste es reducido (en problemas habituales $N \ll M$ si bien los casos $N \gg N$ también pueden aprovecharse de este método trabajando sobre las matrices tipo $[\]$, en lugar de sobre las tipo $[\]$).

La importancia en el caso de un problema reacción difusión es inmediata, pues se resuelve con N sistemas independientes. En el segundo ejemplo de métodos mixtos espectrales-diferencias finitas, ocurre lo mismo. Esta ventaja es muy significativa sobre todo porque las matrices de reacción o espectrales son muy densas y dan lugar a muy malas eficiencias de paralelización. Este método permite desacoplar casi por completo los diferentes modos o especies.

Parece entonces que la técnica aquí presentada podría ser útil en tales situaciones. El estudio de la bibliografía en dichos ámbitos es otra posibilidad que se deja abierta para el futuro.

B.3. Encontrando estacionarios en el sistema real

Una vez vistos algunos ejemplos didácticos pasamos ahora al problema real que se desea resolver, un poco más complejo. El objetivo es alcanzar situaciones estacionarias mediante avance temporal implícito de modelos propuestos en esta tesis.

La matriz de avance temporal implícito es difícil de invertir principalmente por la diferencia de escalas temporales que aparecen en el cálculo del transporte radial. La idea es avanzar mediante un paso implícito los términos más rápidos, asociados al transporte paralelo y las colisiones⁴. Los términos adicionales, incluidas las correcciones de alto orden en radio de Larmor (ver capítulo 4), se avanzarán explícitamente. A pesar de contar sólo con dos términos (colisiones y transporte paralelo), la matriz de avance temporal resultante del método implícito presenta una mezcla de todos los modos de la función de distribución, cada uno de ellos asociado a una velocidad de convección espacial diferente y, por tanto, el problema es multiescala. Esto se traduce en una matriz cuyo condicionamiento empeora a medida que se aumenta el número de modos de expansión en velocidad de la FdD.

El problema de avance implícito puede expresarse como

$$(\mathbf{I} - dt\mathbf{C} - dt\mathbf{R}) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\text{B.10})$$

⁴Puede pensarse que el término colisional muestra una dinámica lenta en un régimen no colisional, pero esto no es cierto para modos altos de la expansión en la función de distribución. Esto es así por que gradientes muy intensos en velocidad son suavizados rápidamente por las colisiones.

donde dt es el paso temporal (un escalar), \mathbf{C} la matriz asociada a colisiones y \mathbf{R} la asociada a convección paralela. Todas las componentes de avance explícito se esconden dentro de \mathbf{b} .

B.3.1. Adaptación del problema

Cada una de las matrices \mathbf{C} y \mathbf{R} , correspondientes a los operadores de colisión y convección respectivamente, se puede expresar como sigue:

- La matriz \mathbf{C} relaciona entre sí los diferentes modos de las FdD de iones y electrones para un punto espacial dado. Por lo tanto se puede expresar como

$$\mathbf{C} = [\alpha_{\mathbf{C}}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}]$$

donde $\mathbf{D}_{\mathbf{C}}$ es una matriz diagonal de orden M (el número de nodos espaciales). Por otro lado $\alpha_{\mathbf{C}}$ es una matriz llena de orden $2N$ (siendo N el número total de modos en que se expande la FdD en velocidad para cada una de las dos especies). Es importante pararse un momento y estudiar la separación que se está llevando a cabo. Por un lado, la matriz $\alpha_{\mathbf{C}}$, al ser llena, indica que todos los modos en velocidad se relacionan entre sí al colisionar. Por otro lado, la matriz $\mathbf{D}_{\mathbf{C}}$ es diagonal, lo que indica que no hay correlación entre los diferentes nodos espaciales, pues el operador de colisión no depende de las derivadas espaciales.

- El término asociado a la convección paralela, es más complejo. Su matriz \mathbf{R} se puede descomponer en

$$\mathbf{R} = [\alpha_{\mathbf{R}}] \cdot [\mathbf{B}_{\mathbf{R}}] + [\hat{\alpha}_{\mathbf{R}}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{R}}]$$

donde $\alpha_{\mathbf{R}}$ y $\hat{\alpha}_{\mathbf{R}}$ son matrices llenas de orden $2N$ que modelizan los acoplamientos entre modos provocados por la parte dependiente de velocidad del término convectivo. En el otro lado, $\mathbf{B}_{\mathbf{R}}$ y $\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{R}}$ son las matrices de acoplamiento entre nodos espaciales procedentes de la discretización de las derivadas espaciales (parte dependiente del espacio del término convectivo). El hecho de separar \mathbf{R} en dos miembros sumados, proviene de la estabilización numérica necesaria en la convección: la estabilización en las discontinuidades mediante un *solver* de Roe es equivalente, como ya se ha visto (ver capítulo 3), a la suma de un término asociado a las matrices de transferencias de modos (modelado aquí como $\alpha_{\mathbf{R}}$) y

otro asociado a su valor absoluto ($\hat{\alpha}_{\mathbf{R}} = |\alpha_{\mathbf{R}}|$). Esta expresión solo es válida en los casos en que la velocidad de normalización no presenta discontinuidades entre elementos. De lo contrario, las matrices $\alpha_{\mathbf{R}}$ y $\hat{\alpha}_{\mathbf{R}}$ no tendrían una estructura semejante en los diferentes nodos espaciales, lo cual se traduciría en que no son expresables en un término del tipo $[\] \cdot [\]$ y no sería posible el desacoplo en la forma aquí presentada.

Así, el sistema de ecuaciones (B.10) puede expresarse como:

$$([\mathbf{I}_{\mathbf{N}}] \cdot [\mathbf{I}_{\mathbf{M}}] - dt[\alpha_{\mathbf{C}}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}] - dt[\alpha_{\mathbf{R}}] \cdot [\mathbf{B}_{\mathbf{R}}] - dt[\hat{\alpha}_{\mathbf{R}}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{R}}]) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\text{B.11})$$

siendo $\mathbf{I}_{\mathbf{N}}$ la matriz identidad de orden N (el número de modos en velocidad) y $\mathbf{I}_{\mathbf{M}}$ la matriz identidad de orden M (el número de nodos espaciales).

Antes de proceder al desacoplo de modos, es importante abordar una última adaptación de las matrices. Sea \mathbf{F} la expresión de la FdD discretizada, es decir, un vector. Sea la transformación sobre \mathbf{F} de sistema de referencia mediante $\mathbf{F} = [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot \mathbf{F}'$. Naturalmente, este proceso se realiza antes de aplicar el algoritmo de avance temporal de Euler implícito. Esto implica (al expresar la ecuación de evolución para \mathbf{F}') la multiplicación por $[\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}]$ de los términos en que aparecía \mathbf{F} en la ecuación original. Así, (B.11) se convierte en⁵:

$$([\mathbf{I}_{\mathbf{N}}] \cdot [\mathbf{I}_{\mathbf{M}}] - dt[\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\alpha_{\mathbf{C}}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}] - dt[\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\alpha_{\mathbf{R}}] \cdot [\mathbf{B}_{\mathbf{R}}] - dt[\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\hat{\alpha}_{\mathbf{R}}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{R}}]) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

donde el término identidad no varía, pues se busca la evolución de \mathbf{F}' . Aplicando las propiedad (B.4)

$$([\mathbf{I}_{\mathbf{N}}] \cdot [\mathbf{I}_{\mathbf{M}}] - dt[\alpha_{\mathbf{C}}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}] - dt[\alpha_{\mathbf{R}}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\mathbf{B}_{\mathbf{R}}] - dt[\hat{\alpha}_{\mathbf{R}}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{R}}]) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

Usando ahora las propiedades (B.5) y (B.6)

$$([\mathbf{I}_{\mathbf{N}} - dt\alpha_{\mathbf{C}}] \cdot [\mathbf{I}_{\mathbf{M}}] - dt[\alpha_{\mathbf{R}}][\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\mathbf{B}_{\mathbf{R}}] - dt[\hat{\alpha}_{\mathbf{R}}] \cdot [\mathbf{D}_{\mathbf{C}}^{-1}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{R}}]) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (\text{B.12})$$

⁵Por simplicidad no se desarrolla explícitamente, pero dentro del vector \mathbf{b} hay que llevar a cabo la misma modificación allí donde sea necesario.

En esencia, se ha aplicado un avance temporal en cada nodo tal que el operador de colisión aplicado es igual en todos los nodos. Por ello aparece la matriz identidad en la parte $[\]$ asociada a las colisiones.

De forma más compacta (B.12), puede expresarse como

$$([\alpha'_C] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\alpha_R] \cdot [\mathbf{B}'_R] + [\hat{\alpha}_R] \cdot [\hat{\mathbf{B}}'_R]) \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (\text{B.13})$$

siendo

$$\alpha'_C = \mathbf{I}_N - dt\alpha_C$$

y

$$\begin{aligned} [\mathbf{B}'_R] &= -dt[\mathbf{D}_C^{-1}] \cdot [\mathbf{B}_R] = [-dt\mathbf{D}_C^{-1} \cdot \mathbf{B}_R] \\ [\hat{\mathbf{B}}'_R] &= -dt[\mathbf{D}_C^{-1}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R] = [-dt\mathbf{D}_C^{-1} \cdot \hat{\mathbf{B}}_R] \end{aligned}$$

Por aligerar la notación, las tildes se eliminarán a partir de ahora. Así, la matriz del sistema (B.13) queda como

$$[\alpha_C] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\alpha_R] \cdot [\mathbf{B}_R] + [\hat{\alpha}_R] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R] \quad (\text{B.14})$$

donde deben recordarse las tildes a la hora de desarrollar las matrices correspondientes.

B.3.2. Resolución

Ahora se procede de modo similar al de los apartados anteriores. Aplicando a (B.14) la descomposición espectral

$$\alpha_C = \Gamma_C \cdot \lambda_C \cdot \Gamma_C^{-1}$$

y las propiedades (B.4-B.7):

$$[\Gamma_C] \cdot [\lambda_C] \cdot [\Gamma_C^{-1}] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\alpha_R] \cdot [\mathbf{B}_R] + [\hat{\alpha}_R] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R]$$

Se ha de notar que la matriz α_C contiene una identidad sumada, por lo que se puede evitar, a través de dt , la aparición de autovalores nulos. Operando un poco más,

$$\begin{aligned} [\Gamma_C] \cdot [\lambda_C] \cdot ([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\lambda_C^{-1}] \cdot [\Gamma_C^{-1}] \cdot [\alpha_R] \cdot [\mathbf{B}_R] \cdot [\Gamma_C] + \\ [\lambda_C^{-1}] \cdot [\Gamma_C^{-1}] \cdot [\hat{\alpha}_R] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R] \cdot [\Gamma_C]) \cdot [\Gamma_C^{-1}]. \end{aligned}$$

Reorganizando mediante las propiedades se obtiene

$$[\Gamma_C \cdot \lambda_C] \cdot ([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\lambda_C^{-1} \cdot \Gamma_C^{-1} \cdot \alpha_R \cdot \Gamma_C] \cdot [\mathbf{B}_R] \\ + [\lambda_C^{-1} \cdot \Gamma_C^{-1} \cdot \hat{\alpha}_R \cdot \Gamma_C] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R]) \cdot [\Gamma_C^{-1}]$$

La idea ahora es tomar una descomposición tal que

$$\Gamma_Z \cdot \lambda_Z \cdot \Gamma_Z^{-1} = \lambda_C^{-1} \cdot \Gamma_C^{-1} \cdot \alpha_R \cdot \Gamma_C,$$

$$\Gamma_Z \cdot \lambda_{\hat{Z}} \cdot \Gamma_Z^{-1} = \lambda_C^{-1} \cdot \Gamma_C^{-1} \cdot \hat{\alpha}_R \cdot \Gamma_C.$$

Obsérvese que los autovalores son diferentes pero las matrices de autovectores son las mismas. Esto no parece posible para el caso de matrices generales. Sin embargo si lo es en el caso trivial de que todos los autovalores de la matriz original α_R tengan el mismo signo. Sin entrar en detalles, se puede llevar a cabo un proceso sobre la ecuación de evolución para conseguir esto: un cambio de sistema de referencia sobre la expansión de la FdD, mediante una matriz del tipo $[\]$, antes de aplicar el algoritmo de resolución. Gracias a esto, se pueden alterar los autovalores asociados a la matriz de convección α_R de un modo conveniente (naturalmente, la matriz de colisión α_C se verá modificada pero, como ya se ha visto, no hay restricciones sobre su forma).

Continuando con el proceso:

$$[\Gamma_C \cdot \lambda_C] \cdot ([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\Gamma_Z \cdot \lambda_Z \cdot \Gamma_Z^{-1}] \cdot [\mathbf{B}_R] + [\Gamma_Z \cdot \lambda_{\hat{Z}} \cdot \Gamma_Z^{-1}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R]) \cdot [\Gamma_C^{-1}]$$

y por tanto

$$[\Gamma_C \cdot \lambda_C \cdot \Gamma_Z] \cdot ([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\lambda_Z] \cdot [\mathbf{B}_R] + [\lambda_{\hat{Z}}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R]) \cdot [\Gamma_Z^{-1} \cdot \Gamma_C^{-1}]$$

Volviendo al sistema de ecuaciones (B.13), se puede expresar como

$$([\mathbf{I}_N] \cdot [\mathbf{I}_M] + [\lambda_Z] \cdot [\mathbf{B}_R] + [\lambda_{\hat{Z}}] \cdot [\hat{\mathbf{B}}_R]) \cdot \mathbf{x}' = \mathbf{b}'$$

donde

$$\mathbf{x}' = [\Gamma_Z^{-1} \cdot \Gamma_C^{-1}] \cdot \mathbf{x}$$

y

$$\mathbf{b}' = [\Gamma_Z^{-1} \cdot \lambda_C^{-1} \cdot \Gamma_C^{-1}] \cdot \mathbf{b}$$

En primer lugar, se observa que tanto las matrices $[\mathbf{I}_N]$ como $[\lambda_Z]$ y $[\lambda_{\hat{Z}}]$ son diagonales. Esto se traduce en que los diferentes modos de la función

de distribución aparecen desacoplados entre sí, y el sistema de ecuaciones puede escindirse en N subsistemas (en casos prácticos $N \ll M$). Se obtiene así una ventaja computacional muy significativa (el coste computacional crece linealmente con el número de modos, pero el error decrece exponencialmente, debido al método numérico espectral). De nuevo, al igual que ocurría en apartados anteriores, las inversas asociadas al cálculo de \mathbf{x} a partir de \mathbf{x}' y \mathbf{b} a partir de \mathbf{b}' son reducidos debido a la naturaleza diagonal por bloques de las matrices asociadas a dichos cambios (todas del tipo []).

Referencias

- [1] M. A. Botchev, J. G. Verwer, *A new approximate matrix factorization for implicit time integration in air pollution modeling*, J. Comp. and Appl. Math. **157**, 309 (2003).

Apéndice C

Detalles de implementación

La codificación y los detalles informáticos de los métodos y modelos no es algo relevante desde un punto de vista físico, pero no se deben menospreciar pues son parte importante del trabajo. Igualmente son importantes los tiempos de computación y la eficiencia de paralelización. De todo ello se habla aquí.

C.1. Paralelización

Para la paralelización se ha usado MPI, por ser cada vez más común y por su simplicidad de programación. MPI es el estándar que define una interfaz para poder enviar mensajes de forma transparente al usuario entre procesadores interconectados. Existen diferentes métodos de comunicación utilizados en supercomputación que ofrecen los requisitos de alta velocidad y baja latencia. Se puede tener desde una red Ethernet o Infiniband¹ en un *cluster* de ordenadores que ofrecen prestaciones medias-altas, hasta máquinas de memorias compartidas y cableadas entre los procesadores que ofrecen la mayor conectividad y prestaciones.

Por tanto, es conveniente fijar una serie de funciones que definan accesos de forma estándar. Los más utilizados son OPENMP [1] y MPI [2]. MPI se utiliza en máquinas de memoria distribuida, tales como clusters de ordenadores. OPENMP es quizás más específico pues está más orientado a computadoras con memoria compartida, o al uso entre diferentes núcleos dentro

¹Estándares de comunicación.

de un mismo procesador, ofreciendo en estos casos igual o superior eficiencia que MPI.

Cada vez parece más común el uso de clusters con redes de alta velocidad en contraposición a las máquinas de memoria compartida, principalmente por el elevado coste de adquisición y mantenimiento en estas últimas.

C.1.1. Eficiencia

Se entiende por eficiencia de paralelización el comportamiento de un código paralelo frente al incremento de procesadores. Una eficiencia óptima indicaría un tiempo de computación $T = T_0/N_{CPU}$ donde T_0 es el tiempo de cálculo que correspondería a trabajar con un solo núcleo de un procesador y N_{CPU} es el número de núcleos usados. Esta situación teórica rara vez se da en aplicaciones prácticas, pues la comunicación entre procesos requiere un porcentaje de tiempo. En la gráfica (C.1) se muestra la eficiencia de paralelización para una simulación típica basada en el dispositivo TJ-II con avance temporal implícito. La simulación se ejecutó en una máquina de memoria compartida².

La eficiencia hasta 40 procesadores es aceptable. En cualquier caso, el resultado se puede mejorar, por ejemplo, usando preconditionamiento en los *solvers* de resolución de las matrices, o un reordenamiento óptimo de las variables en función de la red de comunicación y de la “cercanía” entre procesadores (se entiende cercanía en términos de ancho de banda y latencia).

C.2. Codificación

En última instancia, cualquier modelo físico, matemático o método numérico debe convertirse en un conjunto de líneas de código mejor o peor optimizadas en alguno de los lenguajes de programación existentes en la actualidad.

En la comunidad científica es común trabajar en Fortran: desde su versión IV hasta las más comunes hoy en día, tales como 90-95, u otros perfeccionamientos posteriores (2003-2008). Esto se debe por un lado a la buena adaptación de este lenguaje a aplicaciones científicas, pues es inmediato trabajar con vectores, matrices o números complejos de forma transparente. A esto se añade que la eficiencia en el código máquina producido por los compiladores

²Altix 3700, de Silicon Graphics.

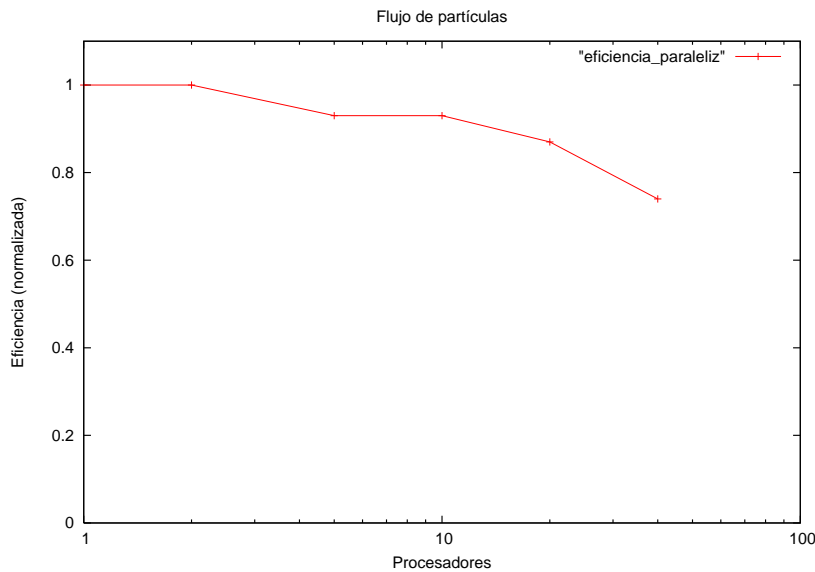


Figura C.1: Eficiencia normalizada en función del número de procesadores. Notar que el eje de abscisas se expresa en escala logarítmica.

es muy buena, pues el desarrollo de Fortran siempre ha mantenido una simbiosis con el mundo científico. Un incentivo adicional es el gran número de librerías y códigos científicos accesibles en este lenguaje.

Sin embargo, comienza a ser común encontrar códigos escritos en C o C++. Por un lado en el mundo no científico es más común usar estos lenguajes, debido a su posición de lenguaje de medio nivel, entre los muy eficientes de bajo nivel como el ensamblador, y los de alto nivel y menos eficientes como BASIC. Esto los hace ideales para tareas dispares, incluso en el desarrollo de sistemas operativos. Por otro lado, la eficiencia de los compiladores C/C++ está ya a la altura de los de Fortran, siendo necesario un estudio estricto para proclamar un vencedor entre ellos. Por último están las preferencias subjetivas por parte de los programadores, un parámetro no desdeñable. Hoy en día los códigos son tan complejos que no todo es optimización en vistas a la ejecución rápida, sino también a la modularidad, la minimización de los errores de programación, depuración y un largo etcétera de factores en los que la subjetividad interviene. Al fin y al cabo, un código realmente útil desde el punto de vista científico debe permanecer en continuo cambio para ser mejorado y completado. Esto hace que el programador y sus preferencias formen parte del mismo.

C.2.1. Código de simulación

El lenguaje de programación elegido para el código es una mezcla entre C y C++ donde las capas superiores están codificadas en C++ orientado a objetos [3] y las inferiores en C. Por capas inferiores se entienden los núcleos en los algoritmos que contengan la mayor carga de computación y las capas superiores aquellas que rigen el comportamiento de los núcleos de cálculo desde un punto de vista más conceptual. Con ello se tiene un equilibrio entre la eficiencia ofrecida por C y la modularidad y reutilización de la programación orientada a objetos.

C.2.2. Software de visualización

El software visual para la generación de mallas está implementado en C++ no solo por su mayor modularidad, sino también para poder funcionar con las API³ visuales con las que interactúa el usuario. En este caso el modo de programación es *orientado a eventos* para permitir tal interacción. Esto quiere decir que, si bien el modo de ejecución sigue siendo secuencial, mediante interrupciones en cualquier punto de la ejecución el usuario puede alterar la secuencia de órdenes: cuando el usuario pulsa cualquier botón de la API se genera un evento que interrumpe un bucle de ejecución predeterminado y entra en subrutinas que resuelven dicha interrupción, es decir, llevan a cabo la tarea asociada con la pulsación del botón. Posteriormente se continúa con la ejecución del bucle genérico.

La API utilizada es Fox-Toolkit [4] pues muestra una curva de aprendizaje óptima y es multiplataforma (actualmente puede funcionar tanto en Linux como en Macintosh o Windows).

C.2.3. Otros detalles

- La energía total consumida es de 2 personas y media · año (es decir, una persona a tiempo completo durante 2,5 años).
- Como arquitectura hardware se ha usado Intel, por ello el compilador más óptimo encontrado y el utilizado ha sido el propietario de Intel.

³Librería de herramientas de programación que abstraen al usuario de su funcionamiento. Normalmente se utilizan para facilitar la programación de aplicaciones visuales.

- El número de líneas de código implementadas ronda las 100.000, de donde 10.000 pertenecen al generador de mallas visual y unas 4.000 al *solver* paralelo de sistemas matriciales. También se incluyen unas 7.000 líneas de un *solver* de Poisson desarrollado para cálculos más precisos del potencial tridimensional que podrá ser utilizado en un futuro: soporta geometrías generales 3D y diferentes bases para los elementos de las mallas, entre ellas las de elementos finitos y espectrales.
- Los tiempos de simulación característicos para un caso *tokamak* analítico, como los mostrados en el capítulo 4, rondan las 20-40 horas de proceso en un solo núcleo de CPU.
- Las simulaciones del TJ-II requieren mucha más precisión en el mallado y por tanto mayor número de elementos. Los tiempos requeridos para las simulaciones del capítulo 5 rondan las 40-150 horas en 24 procesadores, es decir, el equivalente a 1000-3500 horas en una solo núcleo de CPU (incluidas las pérdidas por paralelización).

Referencias

- [1] <http://openmp.org/wp/>
- [2] <http://www.mpi-forum.org/>
- [3] Schach, Stephen, Object-Oriented and Classical Software Engineering, Seventh Edition. McGraw-Hill. ISBN 0-073-19126-4, (2006).
- [4] <http://www.fox-toolkit.org/>

Apéndice D

Sistema de visualización en estéreo

Un aspecto importante a la hora de estudiar los resultados de simulaciones complejas es la visualización de los resultados. En un problema bien conocido, es fácil mostrar con gráficas o incluso numéricamente las cantidades más interesantes que caracterizan dicho problema. Pero esto no es posible en todas las ocasiones; podría darse el caso de ser necesario estudiar con profundidad la mayor cantidad posible de los datos obtenidos en la simulación para entender determinada cuestión de la dinámica del sistema. Esto no es fácil si los datos a analizar poseen, como es el caso, cinco dimensiones. Por ello, se creyó conveniente desde un principio no menospreciar la importancia de la visualización de resultados.

Para llevar a cabo dicha labor de visualización, esta tesis incluye el desarrollo de una plataforma tanto hardware como software para simular y representar datos en tres dimensiones. Dicha plataforma no está restringida a resultados del código aquí presentado, sino que se ha generalizado su uso para hacerla útil en diferentes tareas. Así, en la actualidad se utiliza tanto para el seguimiento de trayectorias dentro de una configuración magnética dada (por ejemplo TJ-II o ITER) como para la representación de datos pertenecientes a otros campos de investigación (por ejemplo proteínas) o incluso didáctica.

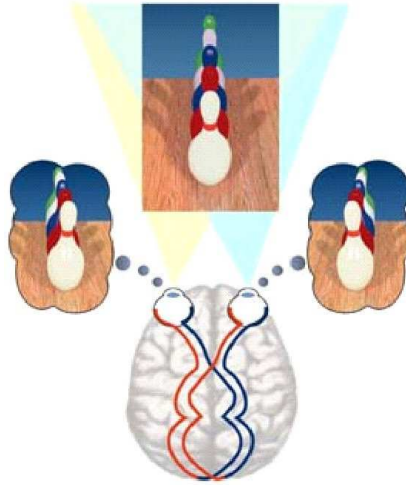


Figura D.1: El cerebro sintetiza dos imágenes para construir una ilusión tridimensional.

D.1. Plataforma Hardware

El hardware se puede dividir en dos partes bien diferenciadas, por un lado los dispositivos para la visualización propiamente dicha y por otro la detección y el seguimiento de sensores para interactuar con el usuario.

Dispositivos de visualización

La forma más natural para estudiar datos en tres dimensiones es utilizar la capacidad del cerebro para fundir dos imágenes bidimensionales en una representación 3D: en esto consiste la técnica de visualización en estéreo (fig. D.1). Esta idea se remonta a la primera mitad del siglo XIX, cuando el profesor de filosofía y físico experimental Charles Wheatstone inventó la cámara estereoscópica con la que era posible tomar una instantánea con este efecto. En esencia, lo único necesario es mostrar a cada ojo del usuario una imagen de la escena desde un punto de vista diferente a la del otro. A mayor distancia entre puntos de vista, mayor será la sensación de tridimensionalidad pero, al mismo tiempo, mayor el esfuerzo “subconsciente” para mezclar las imágenes. En el equilibrio entre ambos extremos se encuentra la mínima molestia a la vez que máxima inmersión por parte del usuario. Este punto es bastante subjetivo y por tanto experimental.

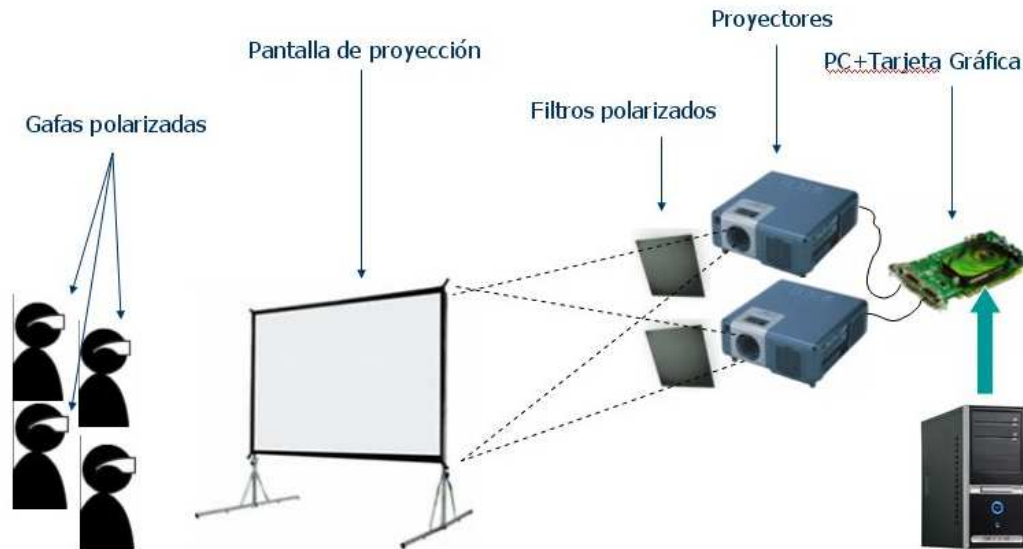


Figura D.2: Esquema del hardware de visualización.

La escena a visualizar en 3D se genera en el ordenador por el software correspondiente. El software también es el encargado de proyectar la escena desde el punto de vista de los ojos del usuario y envía esa imagen al hardware.

El hardware de visualización (figura D.2) consiste en dos proyectores que reciben cada uno una imagen diferente. Ambos dispositivos están alineados de tal forma que proyectan las imágenes sobre la misma pantalla, superpuestas. Inmediatamente después de la salida de los proyectores se sitúan sendos polarizadores que le dan propiedades ópticas diferenciadoras a las imágenes. La luz difundida por las pantallas de proyección convencionales no conserva la polarización, pues la luz difundida pierde parte de sus propiedades. Por ello, se utiliza un material metálico en la construcción de la tela de proyección, de manera que la luz difundida conserve gran parte de la polarización de la luz incidente, a cambio de una direccionalidad mayor. Se llega así a un equilibrio entre máximo ángulo desde el que se puede observar la pantalla y conservación de la polarización que preserve las imágenes que ha de percibir cada ojo.

Para evitar que el usuario obstruya la proyección, se utiliza retroproyección. Otro detalle importante es que, para mantener una alineación precisa

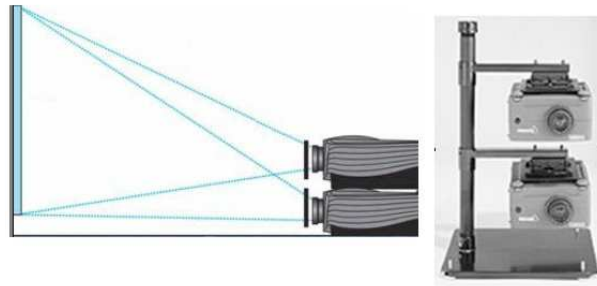


Figura D.3: Es necesaria una ubicación precisa de los proyectores con respecto a la pantalla (izquierda) mediante soportes (derecha).



Figura D.4: Diferentes modelos de gafas polarizadas.

de los proyectores hace falta un soporte resistente (fig. D.3)

El último paso consiste en que el usuario utilice unas gafas polarizadas (fig. D.4) cuya polarización es complementaria a la de las imágenes proyectadas. Así, el ojo izquierdo ve la imagen izquierda pero no la derecha, y viceversa. Naturalmente, la polarización cruzada no es perfecta y existe un fenómeno de *imagen fantasma* por el que cada ojo ve su imagen y un pequeño residuo de la del otro. A mejores polarizadores, menor efecto.

Finalmente el usuario percibe una imagen tridimensional (fig. D.5).

Una cuestión interesante es el tipo de polarización utilizada. Existen dos opciones comunes: polarización lineal o circular. En el caso de la polarización lineal, el fenómeno de imágenes fantasma es ligeramente menor pero el usuario debe mantener las gafas en una posición completamente horizontal, pues una ligera inclinación de la cabeza ya no cancelaría la luz polarizada verticalmente por el polarizador horizontal y viceversa. En el caso de la po-

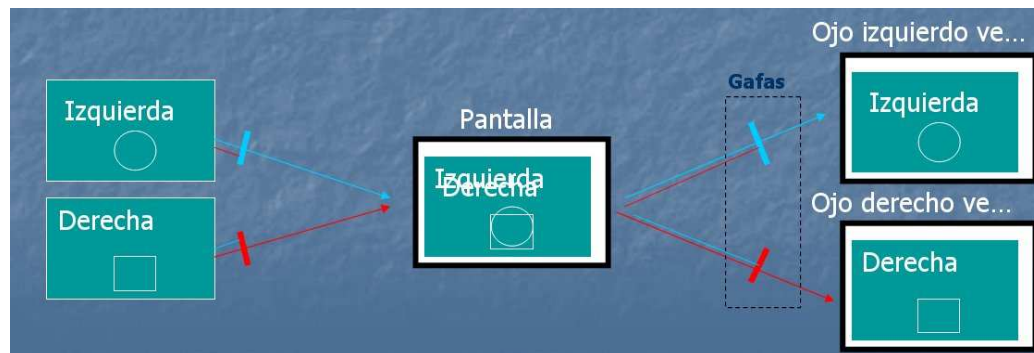


Figura D.5: Esquema de la ruta óptica de las imágenes. A la izquierda las imágenes emitidas por los proyectores. En el centro la imagen entremezclada en la pantalla, a la derecha las imágenes discriminadas por las gafas. En rojo y azul se indican la orientación de la polarización.

larización circular esto no ocurre, pues no depende del giro del polarizador¹. Así, la ligera ganancia ofrecida teóricamente por la polarización lineal, en la práctica no es significativa y por ello se ha elegido la circular como opción.

La técnica aquí descrita se denomina *estéreo pasivo* y ofrece gran calidad en la visualización. En el otro lado se tienen plataformas de *estéreo activo* que ofrecen aún mas calidad pues se basan en la multiplexación de las imágenes en el tiempo, en lugar de en la polarización. Para ello se necesita un solo proyector o pantalla CRT/TFT que sea capaz de emitir al menos dos veces el número imágenes por segundo perceptibles por el ojo. Las imágenes para cada ojo se emiten alternativamente. El usuario posee unas gafas sincronizadas con el ordenador que emite al proyector o pantalla las imágenes de tal modo que oscurecen la visión a los ojos en función de qué imagen se está mostrando en un instante de tiempo dado: si es la del ojo izquierdo, impide ver al ojo derecho y viceversa. La forma en que se oscurecen los cristales de las gafas, mediante cristal líquido en la tecnología actual, es de gran calidad y el fenómeno de imágenes fantasma disminuye hasta ser casi inapreciable. Es por ello que los dispositivos de *estéreo activo* ofrecen mayor claridad pero tienen la desventaja de necesitar un mayor presupuesto, sobre todo para grandes audiencias, porque cada usuario requiere de unas gafas sincronizadas.

¹Si bien esto no es estrictamente cierto en la práctica, donde se aprecia una imagen descolorida y atenuada cuando los polarizadores giran. No obstante, el efecto es despreciable frente al sufrido en el caso de polarización lineal

Sin embargo, la reducción de costes de tecnología difumina cada vez más la frontera entre las técnicas de estéreo activo y pasivo, en la cuestión monetaria.

Control de la posición

Otra consideración importante a la hora de visualizar en tres dimensiones es qué posición se toma como punto de vista del usuario. Si dicha posición es fija, no hay mayor problema: basta con introducirla con antelación en el software. Sin embargo, sería deseable que el usuario pudiera moverse *dentro* de la escena e interactuar con ella. Para conseguir este efecto es imprescindible que el software conozca la posición de todos los puntos que requieran de interacción. El más importante de todos es la posición de los ojos que, con buena precisión, se puede extraer de un sensor unido a las gafas o la cabeza². También es interesante poder captar la posición de las manos y la orientación. Sólo con el seguimiento de estos 3 puntos con 6 grados de libertad cada uno de ellos (tres coordenadas y tres ángulos), la interactividad con las aplicaciones mejora sustancialmente:

- El sensor de cabeza permite mantener continuamente el punto de vista desde los ojos del usuario, y así poder atravesar el escenario para acercarse a un detalle o girar la cabeza para ver datos ocultos por otros en una perspectiva dada. Esto permite acercarse mucho a la sensación percibida observando una imagen holográfica. Se pierde sin embargo el punto de enfoque, pues en la proyección los ojos siempre deben estar enfocados en la pantalla: en los hologramas incluso el enfoque debe realizarse sobre la imagen virtual. Hay que mencionar que la inmersión solo puede percibirla un usuario, pues la proyección sólo es válida desde su punto de vista. De nuevo en un holograma esto no es así.
- Los sensores de posición de las manos pueden utilizarse para girar o ampliar la escena, interactuar con los elementos de la simulación o los parámetros de datos representados, etc.

Es importante hacer notar las capacidades de la plataforma de visualización en lo relativo al término *realidad expandida* recientemente acuñado. Un

²La desviación típica en altura y profundidad de la cabeza no es significativa a efectos prácticos. Por simetría, la anchura no afecta. La desviación típica en la distancia entre ojos igualmente se considera despreciable, si bien en casos extremos se pueden modificar los parámetros.

ejemplo es la mejor explicación: en una de las aplicaciones implementadas, el usuario puede coger con su mano una raqueta con la que podrá lanzar una partícula a diferentes velocidades y direcciones según la fuerza con la que golpee. Al margen del valor científico de la misma, el punto importante es que el usuario ve la raqueta sobre su mano, unida a ella. Y cuando da un golpe a la pelota con la raqueta, parte del mundo real (la mano del usuario y su movimiento) se ven entremezclados con el mundo virtual (la paleta y la pelota). A esto se refiere el término “realidad expandida”. Existen situaciones al representar datos o en simulaciones rápidas en que dichas capacidades podrían ser útiles, al igual que un ratón de ordenador se ha convertido en algo imprescindible para cualquier trabajo profesional.

Existen diferentes formas de capturar la posición de los sensores. Las más habituales son:

- Mediante ultrasonidos: se mide el tiempo de vuelo de un pulso de ultrasonidos y se obtienen las distancias entre diferentes puntos que caracterizan de forma unívoca la posición y la orientación del sensor. Es un método preciso pero, al ser los posicionadores la parte económicamente más costosa, las ampliaciones de los mismos son caras.
- Mediante ondas electromagnéticas: en este caso se utiliza el tiempo de vuelo de una señal de radiofrecuencia. Tiene como inconveniente el que los elementos conductores en la zona de trabajo pueden perturbar las mediciones. Económicamente la situación es parecida al caso de ultrasonidos, el número de posicionadores caracteriza el precio final y por tanto las ampliaciones son caras.
- Seguimiento mediante cámaras: los posicionadores son esferas reflectantes iluminadas por destellos infrarrojos. Un conjunto de cámaras detectan las posiciones de las esferas y procesan internamente las imágenes para enviar en tiempo real la interpretación de los datos a un ordenador que centraliza la información de todas las cámaras y ofrece la ubicación y la orientación de los posicionadores. La precisión de este mecanismo depende del número de cámaras utilizadas (de 10 a 20). El coste de incrementar el número de posicionadores es reducido, pues todas las cámaras monitorizan a todos los posicionadores, y éstos no son más que reflectores.

Se ha elegido la opción de seguimiento mediante cámaras ofrecido por la compañía OptiTrack [1] por tener un coste similar a las otras tecnologías pero un sobrecoste de ampliación bajo. Eso permitiría en un futuro la capacidad de interacciones precisas a través de, por ejemplo, el seguimiento de varios dedos de las manos o parte de los brazos del usuario.

D.2. Software

Un código desarrollado en C++ traduce las escenas tridimensionales generadas, a partir de datos y simulaciones a representar, en proyecciones bidimensionales para cada ojo. Dicha traducción la lleva a cabo la tarjeta gráfica del ordenador principal mediante una implementación libre (Mesa) de la especificación OpenGL. Ya se ha dicho que en la proyección es necesario tener en cuenta la posición del usuario para situar su imagen en el mundo virtual de la simulación, pero también es necesario para compensar la distorsión causada por el hecho de que el usuario no ve la pantalla de proyección de frente, sino desde su punto de vista.

Un detalle interesante es el modo de extraer las dos imágenes del PC para enviarlas a los procesadores. La mayoría de las tarjetas gráficas actuales disponen de salida para dos monitores, dividiendo el escritorio en dos mitades. Esta propiedad se ha aprovechado del siguiente modo: una vez generadas las imágenes de cada ojo, se sitúan en pantalla una al lado de la otra ocupando por completo el escritorio. Si ambas salidas de la tarjeta gráfica se envían a los proyectores (fig. D.6), cada uno de ellos recibirá una imagen de un ojo. Este sencillo sistema permite la máxima compatibilidad con el hardware convencional.

En un ordenador secundario se ejecuta el software propietario del sistema de posicionamiento bajo Windows que puede comunicarse mediante sockets con otros procesos. Esta capacidad se utiliza para comunicarse, mediante un proceso puente, con el ordenador principal bajo Linux y así integrar el software de representación, simulación y visualización con el de posicionamiento. Así, el software de las cámaras ofrece la posición tridimensional de los posicionadores del usuario. A partir de dichos datos y las simulaciones, se procesan las imágenes para cada ojo que, posteriormente, se envían a la plataforma de visualización y, de nuevo, llegan al usuario.

Puesto que es un PC el que controla los posicionadores y otro la visualiza-

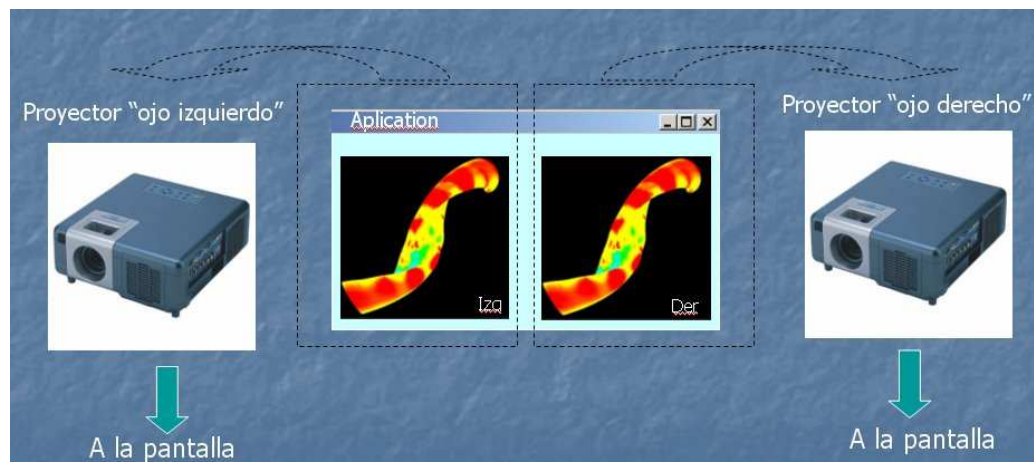


Figura D.6: Envío de imágenes a cada proyector.

ción, la expansión de la plataforma a un sistema CAVE³ es inmediata: basta con añadir un PC por cada nueva pantalla. Todas estas nuevas máquinas se conectan al ordenador central que contiene la información de los posicionadores gracias a las cámaras. Así, cada PC *esclavo* conoce la distancia y posición relativa a los posicionadores y podrá calcular, de forma independiente, la proyección sobre la pantalla asociada a dicha máquina.

D.3. Resultado

Finalmente, se muestran algunas imágenes de la plataforma. Por ejemplo, el detalle de una cámara de seguimiento de posición (fig. D.7) donde se aprecia en círculo la serie de diodos *led* infrarrojos que actúan de flash y en el centro el objetivo con filtro que solo permite el paso de luz en el infrarrojo cercano, más allá del espectro visible⁴. En la figura D.8 se aprecia en detalle los proyectores junto a sus filtros polarizadores y soporte.

La configuración de la constelación de cámaras se puede ver en la figura D.9. Se tienen dos círculos principales a diferentes alturas que permiten

³Habitáculo compuesto por entre 3 y 6 pantallas en lugar de paredes, techo y suelo, sobre las cuales se emiten proyecciones que provocan la sensación, a un usuario en su interior, de estar inmerso por completo en un mundo virtual [2].

⁴Los dispositivos de captura de imágenes convencionales (ya sean CCD o CMOS) presentan una sensibilidad en el espectro mayor que la del ojo humano.



Figura D.7: Detalle de cámara usada para ubicar los posicionadores.

observar los posicionadores aunque el usuario tape parcialmente la configuración.

Algunas simulaciones son de carácter más científico, para el seguimiento de partículas dentro de un dispositivo de fusión (fig. D.10) y otras tienen un carácter más didáctico (figs. D.11 y D.12).

Por último, la plataforma puede utilizarse sin seguimiento para presentaciones 3D a grupos numerosos (fig. D.13).



Figura D.8: Proyectores con filtros polarizadores y soporte.



Figura D.9: Detalle de la constelación de cámaras.

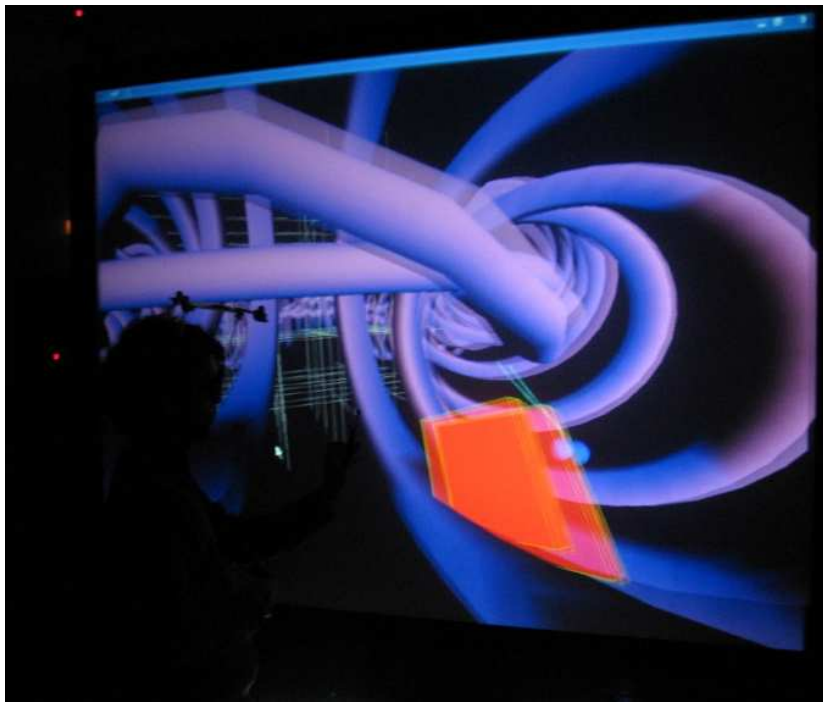


Figura D.10: Simulación a tiempo real de partículas lanzadas dentro de la cámara de vacío del TJ-II. En la pantalla se aprecia la “imagen doble” característica de los sistemas de proyección en estéreo pasivo: cada una de las imágenes se emite en polarización ortogonal a la otra.

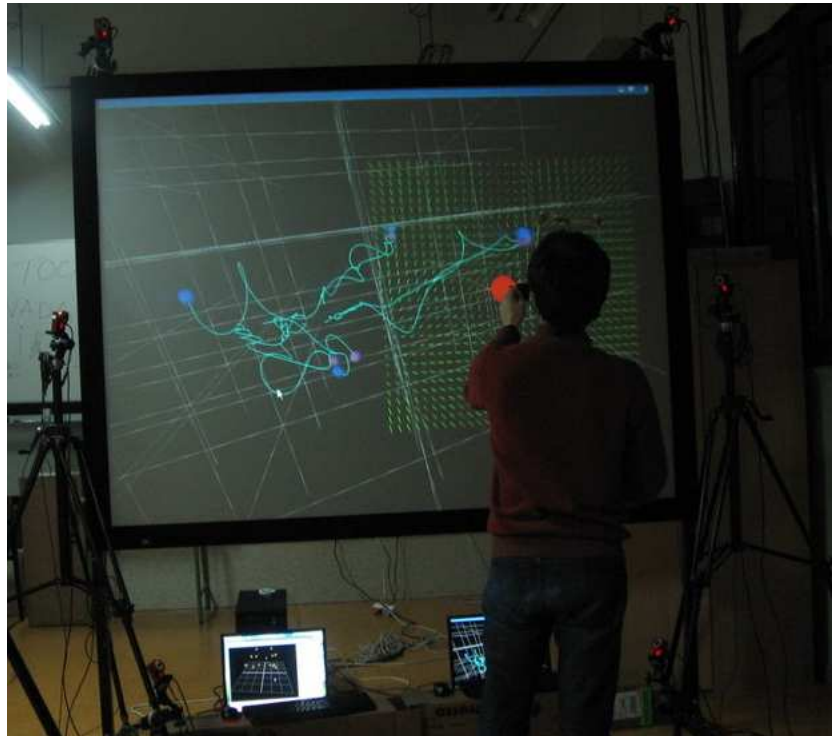


Figura D.11: Simulación de partículas cargadas y visualización del campo eléctrico que provocan.

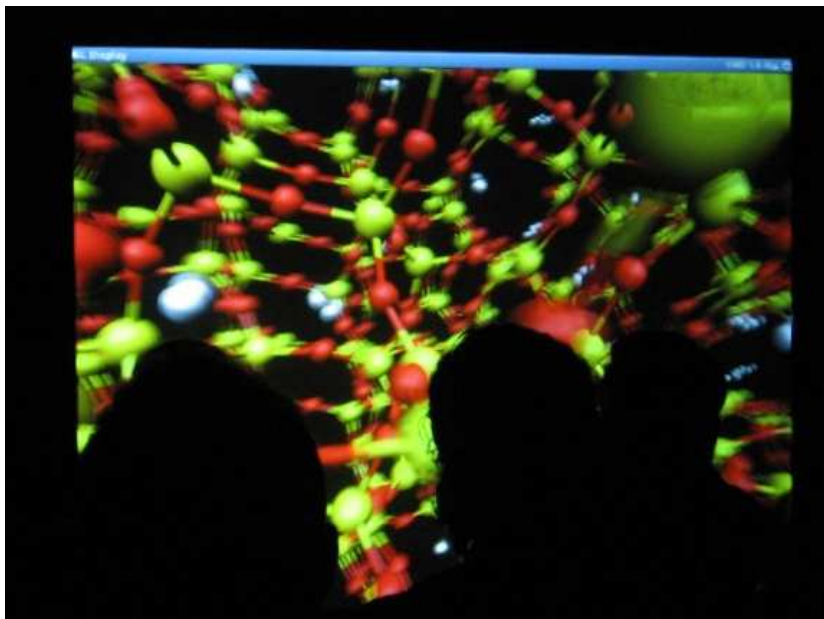


Figura D.12: Representación de los resultados de una simulación de difusión de tritio en red cristalina.



Figura D.13: Nutrido grupo de público con gafas polarizadas.

Referencias

[1] <http://www.naturalpoint.com/optitrack/>

[2] http://en.wikipedia.org/wiki/Cave_Automatic_Virtual_Environment