

Cálculo Numérico del Transporte
Mediante la Ecuación Cinética de
Deriva para Plasmas en Geometría
Magnética Toroidal: Preliminares

J. M. Reynolds
D. López-Bruna

Toda correspondencia en relación con este trabajo debe dirigirse al Servicio de Información y Documentación, Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, Ciudad Universitaria, 28040-MADRID, ESPAÑA.

Las solicitudes de ejemplares deben dirigirse a este mismo Servicio.

Los descriptores se han seleccionado del Thesauro del DOE para describir las materias que contiene este informe con vistas a su recuperación. La catalogación se ha hecho utilizando el documento DOE/TIC-4602 (Rev. 1) Descriptive Cataloguing On-Line, y la clasificación de acuerdo con el documento DOE/TIC.4584-R7 Subject Categories and Scope publicados por el Office of Scientific and Technical Information del Departamento de Energía de los Estados Unidos.

Se autoriza la reproducción de los resúmenes analíticos que aparecen en esta publicación.

Catálogo general de publicaciones oficiales
<http://www.060.es>

Depósito Legal: M -14226-1995

ISSN: 1135 - 9420

NIPO: 471-09-024-X

Editorial CIEMAT

CLASIFICACIÓN DOE Y DESCRIPTORES

S70

NUMERICAL DATA; CALCULATION METHODS; THREE-DIMENSIONAL
CALCULATIONS; TOROIDAL CONFIGURATION; TRANSPORT; PLASMA;
GEOMETRY; MAGNETIC CONFINEMENT; EQUATIONS

Cálculo Numérico del Transporte mediante la Ecuación Cinética de Deriva para Plasmas en Geometría Magnética Toroidal: Preliminares

Reynolds, J.M.; López-Bruna, D.

28 pp. 1 fig. 28 ref.

Resumen:

Este informe es el primero de una serie en la que se aborda el cálculo numérico de la evolución de los plasmas para fusión en geometría toroidal general, abarcando los del TJ-II. Se hace un tratamiento cinético resolviendo la evolución de la función de distribución de una o varias especies del plasma en coordenadas de centro guía. La función de distribución se expresa mediante una maxwelliana modulada por series de polinomios en las coordenadas cinéticas sin otras aproximaciones que la propia del centro guía y las capacidades de cálculo. El código permite incluir también el potencial electrostático tridimensional de manera autoconsistente, pero se ha fijado como objetivo inicial resolver el transporte neoclásico. A la hora de discretizar la ecuación para su resolución numérica se ha optado por un método conservativo de alto orden (método de diferencias espectrales). En este primer informe, además de justificar el trabajo, se describen las ecuaciones de evolución y sus aproximaciones, y las líneas básicas de la resolución numérica.

Numerical Calculation of Transport Based on the Drift Kinetic Equation for plasmas in General Toroidal Magnetic Geometry

Reynolds, J.M.; López-Bruna, D.

28 pp. 1 fig. 28 ref.

Abstract:

This report is the first of a series dedicated to the numerical calculation of the evolution of fusion plasmas in general toroidal geometry, including TJ-II plasmas. A kinetic treatment has been chosen: the evolution equation of the distribution function of one or several plasma species is solved in guiding center coordinates. The distribution function is written as a Maxwellian one modulated by polynomial series in the kinetic coordinates with no other approximations than those of the guiding center itself and the computation capabilities. The code allows also for the inclusion of the three-dimensional electrostatic potential in a self-consistent manner, but the initial objective has been set to solving only the neoclassical transport. A high order conservative method (Spectral Difference Method) has been chosen in order to discretize the equation for its numerical solution. In this first report, in addition to justifying the work, the evolution equation and its approximations are described, as well as the baseline of the numerical procedures.

Cálculo numérico del transporte mediante la ecuación cinética de deriva para plasmas en geometría magnética toroidal: Preliminares

J. M. Reynolds, D. López-Bruna

RESUMEN

Este informe es el primero de una serie en la que se aborda el cálculo numérico de la evolución de los plasmas para fusión en geometría toroidal general, abarcando los del TJ-II. Se hace un tratamiento cinético resolviendo la evolución de la función de distribución de una o varias especies del plasma en coordenadas de *centro guía*. La función de distribución se expresa mediante una maxwelliana modulada por series de polinomios en las coordenadas cinéticas sin otras aproximaciones que la propia del centro guía y las capacidades de cálculo. El código permite incluir también el potencial electrostático tridimensional de manera autoconsistente, pero se ha fijado como objetivo inicial resolver el transporte neoclásico. A la hora de discretizar la ecuación para su resolución numérica se ha optado por un método conservativo de alto orden (método de diferencias espectrales). En este primer informe, además de justificar el trabajo, se describen las ecuaciones de evolución y sus aproximaciones, y las líneas básicas de la resolución numérica.

Índice

1.. Introducción	1
2.. Ecuación de evolución	6
3.. Función de distribución	11
4.. Adaptación al esquema numérico	21
5.. Resumen	27
Referencias	28

1. Introducción

En este informe describimos la primera etapa de la construcción de un código de transporte para estudiar plasmas típicos de fusión por confinamiento magnético, código que dotaremos de flexibilidad suficiente para que pueda adaptarse a geometrías toroidales tan complejas como la del dispositivo TJ-II [1]. En pocas palabras, la idea es desarrollar 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 [2]. 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 [3].

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. [4]). 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 (véanse, p. ej., las referencias [5, 6] o la revista [7]). 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 [8]. Un tratamiento completo basado en la mecánica hamiltoniana puede encontrarse en los libros [9, 10]. 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 espaciotemporales 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*^{*}, 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 $\lambda_D \ll \rho_L \ll \epsilon \ll L_H, \lambda_{\text{mfp}}$; es decir, las longitudes L_H y λ_{mfp} son considerablemente mayores que ϵ . 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” [11]. 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: para cada especie de partículas se expande f en función de ϵ ,

$$f = \sum_i \epsilon^i f_i$$

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. [3] 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

$$\epsilon = \frac{\rho_L}{L_H} = \frac{\omega}{\Omega_L} \ll 1. \quad (1.1)$$

^{*}En inglés “mean free path”, motivo por el que se suelen usar las siglas “mfp”.

La ecuación de evolución puede jerarquizarse entonces* 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 centrada en velocidad macroscópica nula y 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),

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

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.

En nuestro programa vamos a resolver numéricamente la ecuación cinética. El parámetro ϵ es suficientemente pequeño en muchos casos de interés*, lo que justifica, primero, el usar una ecuación cinética de deriva siguiendo la dinámica del centro guía de las partículas. Segundo, podemos expresar la función de distribución como $f = f_0 + \mathcal{O}(\epsilon)$ siendo f_0 maxwelliana. Sin embargo, que ϵ sea pequeño *no significa que los efectos asociados a las correcciones dadas por f_1, f_2, \dots , sean despreciables en el problema del transporte*. Nuestra ecuación de evolución se basa en la pequeñez de ϵ (resolvemos la ecuación cinética de deriva) pero no en cortar a ningún orden específico. Esto es una diferencia esencial con cualquier código 1-D: por consistencia con el detalle de descripción de f 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) 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 y, por tanto, la turbulencia microscópica hasta escalas próximas a $k \sim \rho_L^{-1}$, 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 puente 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,

*No se trata de la única manera de proceder. Aquí estamos resumiendo el procedimiento expuesto en la Ref. [10].

*Son 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.

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 [12]. 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 no locales 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.

Para alcanzar el objetivo final se plantean varias etapas, la primera de las cuales consiste en capturar las facetas del transporte colisional dada una configuración de campos eléctrico y magnético. En una segunda etapa se pretende obtener el campo eléctrico *radial* en estado estacionario –en presencia de fuentes de energía y partículas– cuando evolucionan dos especies, iones y electrones. Como posibilidad última se prevé resolver el campo eléctrico tridimensional, aunque quizás esto no sea posible sin hacer simplificaciones que habrá que estudiar. En cualquier caso reducimos el problema a la dinámica de los centros guía.

La envergadura del proyecto desaconseja presentar todo el trabajo en un solo informe. Aunque actualmente se está lejos del objetivo final, será útil ir presentando los aspectos ya desarrollados: fundamento teórico y estructura general del código, métodos numéricos, herramientas de visualización. Empezamos con este informe dando una idea general de todo el modelo teórico que servirá para enmarcar, en siguientes entregas, los esquemas numéricos, los resultados y cualquier desarrollo ulterior. Hemos preferido desarrollar con más detalle de lo habitual los pasos matemáticos, en lugar de poner sólo las referencias* o los hitos de cada desarrollo: el motivo es, además de facilitar la lectura, que la serie de informes se convierta en un documento razonablemente autocontenido.

De aquí en adelante, el informe se estructura de la siguiente manera. En la sección 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 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. Una de las novedades del método es suponer que dicha normalización es constante en diferentes regiones de las coordenadas espaciales, y tener en cuenta el salto discontinuo entre ellas. Esto permite mantener la linealidad del método en la parte convectiva

*En realidad, la variedad de matices que se encuentran en la literatura hace que los métodos aquí usados no aparezcan explícitamente en una única referencia. Seguir los argumentos de este trabajo sin disponer de un desarrollo explícito sería muy incómodo.

(siempre que el potencial eléctrico sea constante), sin tener que truncar la expansión de la función de distribución a ningún orden concreto. En la sección 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 que se convectan hasta la precisión de la máquina de cómputo. El informe acaba con un pequeño resumen y un avance de contenidos del siguiente informe.

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 pseudo-partículas 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 [9, 10]. 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 [11]. 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

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f_a \mathbf{v}) + \nabla_{\mathbf{v}} \cdot (f_a \mathbf{a}) = \mathcal{C}_{ab} \quad (2.1)$$

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. 2.1 puede expresarse también como

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_a + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f_a = \mathcal{C}_{ab}, \quad (2.2)$$

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

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 $v = |\mathbf{v}|$, $\phi = \arccos(\mathbf{v} \cdot \mathbf{b}/v)$ 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:

$$\begin{aligned} v &= v_t \sqrt{\beta} \\ \phi &= \arccos \lambda \\ \theta &= \theta \end{aligned} \tag{2.3}$$

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 importante* 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 3 y 4.

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),

$$\mathbb{J}_{\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{v}} = \frac{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})}{\partial(\mathbf{x}', v, \theta, \phi)} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial(v, \theta, \phi)} \end{pmatrix}. \tag{2.4}$$

A continuación, pasemos a las coordenadas del centro guía,

$$\mathbb{J}_{\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{G}} = \frac{\partial(\mathbf{x}', v, \theta, \phi)}{\partial(\mathbf{x}, \beta, \lambda, \theta)} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \frac{\partial(v, \theta, \phi)}{\partial \mathbf{x}} & \frac{\partial(v, \theta, \phi)}{\partial(\beta, \lambda, \theta)} \end{pmatrix}, \tag{2.5}$$

y construyamos la matriz jacobiana de la transformación completa:

$$\mathbb{J}_{\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{G}} = \mathbb{J}_{\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{v}} \mathbb{J}_{\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{G}} = \frac{\partial(\mathbf{x}, \mathbf{v})}{\partial(\mathbf{x}, \beta, \lambda, \theta)} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial(v, \theta, \phi)} \cdot \frac{\partial(v, \theta, \phi)}{\partial \mathbf{x}} & \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial(v, \theta, \phi)} \cdot \frac{\partial(v, \theta, \phi)}{\partial(\beta, \lambda, \theta)} \end{pmatrix}. \tag{2.6}$$

Observamos que, al mantenerse en definitiva la misma parte espacial el jacobiano de la transformación, o determinante $\mathbb{J}_{\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{G}} = |\mathbb{J}_{\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{G}}|$, sólo contiene las nuevas variables Ec. 2.3.

Obtengamos explícitamente la segunda caja de la diagonal de la matriz Ec. 2.6. La transformación primera es un cambio a coordenadas esféricas:

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

*Se 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 $V_{\parallel} = 0$.

a la que corresponde un jacobiano $J_{E \rightarrow V} = v^2 \sin \phi$. En cuanto a la transformación Ec. 2.3, tenemos

$$\frac{\partial(v, \theta, \phi)}{\partial(\beta, \lambda, \theta)} = \begin{pmatrix} \frac{v_t^2}{2v} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{1-\lambda^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

de donde obtenemos el jacobiano de nuestra transformación total:

$$J_{E \rightarrow G} = -\frac{1}{2} v v_t^2 \quad (2.8)$$

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

$$\sqrt{g} = \frac{1}{2} v_t^3 \beta^{\frac{1}{2}}. \quad (2.9)$$

El elemento de volumen correspondiente es

$$d\mathcal{V} = \sqrt{g} dx d\beta d\lambda d\theta = \frac{1}{2} v_t^3 \beta^{\frac{1}{2}} dx d\beta d\lambda d\theta. \quad (2.10)$$

Como hemos visto, las velocidades que pretendemos introducir en la Ec. 2.2 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

$$d\mathcal{V}_v = \int_0^{2\pi} \sqrt{g} d\beta d\lambda d\theta = \pi v_t^3 \beta^{1/2} d\beta d\lambda. \quad (2.11)$$

La forma de la Ec. 2.2, al presentar productos escalares de elementos covariantes y contravariantes, permite una expresión inmediata en las nuevas coordenadas,

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot \nabla (f_a(\mathbf{x}, \beta, \lambda)) + \frac{d\beta}{dt} \frac{\partial f_a(\mathbf{x}, \beta, \lambda)}{\partial \beta} + \frac{d\lambda}{dt} \frac{\partial f_a(\mathbf{x}, \beta, \lambda)}{\partial \lambda} = \mathcal{C}_{ab}, \quad (2.12)$$

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:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f(\mathbf{x}, \beta, \lambda)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(f(\mathbf{x}, \beta, \lambda) \frac{d\mathbf{r}}{dt} \right) + \\ & \frac{1}{\sqrt{\beta}} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sqrt{\beta} f(\mathbf{x}, \beta, \lambda) \frac{d\beta}{dt} \right) + \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(f(\mathbf{x}, \beta, \lambda) \frac{d\lambda}{dt} \right) = \mathcal{C}_{ab}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

tal como se obtiene al hacer la derivada covariante directamente en la Ec. 2.1 con el jacobiano 2.9. 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 2.11. Así, si hubiera que calcular un gradiente espacial de cualquier función dependiente de β , habría que considerar que

$$\frac{d}{d\mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \nabla \beta(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial \beta} = \nabla - 2\beta \nabla \ln v_t(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial \beta}. \quad (2.14)$$

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. Derivas del centro guía

En la Ec. 2.13 debemos evaluar las derivadas totales. En un tratamiento sistemático, las derivas del centro guía se pueden obtener jerarquizando la ecuación de equilibrio de la densidad de fuerzas en el parámetro $|\boldsymbol{\rho} \cdot \nabla \ln B|$, donde $\boldsymbol{\rho}$ es el radio de Larmor o vector posición de la partícula desde el centro guía.

Nuestro interés final son plasmas del estilo de lo que se encuentra en una máquina como el TJ-II, donde las condiciones del plasma permiten en buena aproximación despreciar el radio de Larmor en las derivas ya que éste es del orden del milímetro para las mayores órbitas de Larmor, las de los iones. Además, vamos a considerar que el campo es magnetostático y que el campo eléctrico varía con suficiente lentitud*. Con esto, nos quedan dos contribuciones principales a la velocidad perpendicular: la deriva eléctrica (o deriva ExB) sin correcciones de radio de Larmor,

$$\mathbf{v}_E = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2}, \quad (2.15)$$

y las derivas por curvatura y por gradiente de la intensidad del campo magnético, que aunamos en la expresión conocida [13, 14]

$$\mathbf{v}_{\nabla B} = \frac{m(2v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2)}{2qB^3} \mathbf{B} \times \nabla B. \quad (2.16)$$

En cuanto a la deriva paralela, expresémosla de momento como $v_{\parallel} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{b}$. Tenemos, entonces, que la velocidad de deriva de los centros guía en la Ec. 2.12 es

$$\mathbf{v}_d = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}_E + \mathbf{v}_{\nabla B} + v_{\parallel} \mathbf{b}. \quad (2.17)$$

Expresemos \mathbf{v}_d 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. 2.17 queda

$$\mathbf{v}_d = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} + \frac{mv_t^2 \beta (1 + \lambda^2)}{2qB^3} \mathbf{B} \times \nabla B + v_t \sqrt{\beta} \lambda \mathbf{b}. \quad (2.18)$$

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 $\partial_t \varphi \ll \mathbf{v}_d \cdot \nabla \varphi$, lo que simplifica la expresión de la variación de β que obtenemos mediante la constancia de la energía total $\mathcal{E} = (1/2)mv^2 + q\varphi$:

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

*Esto nos permite prescindir por ahora de la deriva de polarización, si bien se prevé incluirla en un futuro para tratar los campos eléctricos autoconsistentes. Al igual, habrá que incluir otros términos para los casos en los que $\nabla \times \mathbf{B}$ no sea despreciable.

esto es,

$$\frac{d\beta}{dt} \approx \frac{2q}{mv_t^2} \mathbf{v}_d \cdot \mathbf{E}. \quad (2.19)$$

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. [4]),

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

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

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

donde podemos introducir la Ec. 2.19 para obtener

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1 - \lambda^2}{2\beta\lambda} \mathbf{v}_d \cdot \left(\frac{2q}{mv_t^2} \mathbf{E} - \beta \nabla \ln B \right). \quad (2.20)$$

Al sustituir la Ec. 2.18 en las expresiones Ec. 2.19 y Ec. 2.20 se simplifican algunos términos por perpendicularidad, de manera que

$$\frac{d\beta}{dt} = \left[\frac{\beta(1 + \lambda^2)}{B^3} \mathbf{B} \times \nabla B + \frac{2q}{mv_t^2} \beta^{1/2} \lambda \mathbf{b} \right] \cdot \mathbf{E} \quad (2.21)$$

y

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1 - \lambda^2}{2} \left[\left(\lambda \frac{\mathbf{B} \times \nabla B}{B^3} + \frac{2q}{mv_t^2 \beta^{1/2}} \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{E} - v_t \beta^{1/2} \nabla \ln B \cdot \mathbf{b} \right]. \quad (2.22)$$

Usaremos estas fórmulas en la ecuación de evolución, Ec. 2.13.

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 [15]. 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 dado*. 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} 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. Recordemos que, en cualquier caso, la función de distribución maxwelliana es solución a la ecuación de Vlasov para una especie, es decir, a la

*Una discusión rigurosa sobre cómo y en qué condiciones se llega a la ecuación de Vlasov puede encontrarse, p. ej., en la referencia [11].

Ec. 2.2 sin el término colisional. 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 [3].

En este trabajo se adopta el método de la Ref. [16] para \mathcal{C}_{ab} . Allí se trata la función de distribución de manera semejante a como lo haremos en la sección 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

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

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,

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

3. Función de distribución

Una vez descrita la ecuación de evolución (Ec. 2.13) y hechos explícitos sus ingredientes (2.21 y 2.22), vamos a dedicar esta sección a describir la función de distribución.

3.1. Criterios generales de elección

Avanzábamos en la introducción 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 [17] y puede encontrarse en muchas referencias generales, como [10], pero haremos aquí una breve introducción para ayudar también a fijar la notación.

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

$$f_{\text{Maxw}}(v) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}v_{\text{th}}} \right)^3 e^{-\frac{v^2}{v_{\text{th}}^2}}, \quad (3.1)$$

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 $v_t = v_{\text{th}}$:

$$f_{\text{M}}(\beta) = K_{\text{M}} e^{-\beta} \quad (3.2)$$

dada la constante

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

Tenemos entonces que nuestras funciones de distribución son

$$f(\beta, \lambda) = K_{\text{M}} e^{-\beta} \hat{f}(\beta, \lambda), \quad (3.3)$$

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 hallar* el momento $\mathbf{m}_k = \int v^k f d\mathcal{V}_v$. Si encontramos unos $|J_i\rangle$ ortogonales por un producto escalar en \mathcal{P} que involucre el factor $e^{-\beta}$ (ver la Ec. 3.3), \mathbf{m}_k se expresará en una manera formalmente semejante a:

$$\mathbf{m}_k = \sum_i a_i \langle J_i | \sum_j b_j |J_j\rangle = \sum_{i,j} a_i b_j \langle J_i | J_j \rangle = \sum_{i,j} a_i b_j \delta_{ij} = \sum_i a_i b_i, \quad (3.4)$$

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

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

A continuación detallamos los aspectos recién descritos.

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 [18]*:

$$\int_0^\infty d\beta e^{-\beta} \beta^j L_m^j(\beta) L_n^j(\beta) = \frac{\Gamma(n+j+1)}{n!} \delta_{mn} \quad (3.5)$$

$$\int_{-1}^1 d\lambda P_m(\lambda) P_n(\lambda) = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn}, \quad (3.6)$$

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 semientero.

La sugerencia para elegir la base de funciones ortogonales es que la función peso que las ortogonaliza incluya los factores obligados mencionados antes: el jacobiano** \sqrt{g} , la normalización de la pseudomaxwelliana f_M y su exponencial (Ec. 3.2):

$$K(\beta, \lambda) = K(\beta) = 2\pi\sqrt{g}f_M = 2\pi\sqrt{g}K_M e^{-\beta} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \beta^{1/2} e^{-\beta} \quad (3.7)$$

Comprobemos ahora que podemos definir una expansión apropiada de \hat{f} para su uso en integrales del estilo de la Ec. 3.4:

$$\hat{f}(\beta, \lambda) = \sum_{i,j} C_{ij} J_{ij}(\beta, \lambda), \quad (3.8)$$

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

$$J_{ij}(\beta, \lambda) = k_{ij} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda). \quad (3.9)$$

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. 3.7 tenemos definido un producto escalar

*Puede consultarse cualquier otra referencia sobre la materia, p. ej. [19, 20] o las referencias [21, 22, 23] en la red.

**El jacobiano aparece en el elemento de volumen en el espacio de velocidades, Ec. 2.11. Si usamos el jacobiano, conviene recordar que en el elemento de volumen ya se ha hecho una integración; de ahí que escribamos $d\mathcal{V}_v = 2\pi\sqrt{g}d\beta d\lambda$.

que ortogonaliza las J_{ij} :

$$\begin{aligned}
\langle J_{ij} | J_{kl} \rangle &= \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda K(\beta) J_{ij}(\beta, \lambda) J_{kl}(\beta, \lambda) = \\
&= \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda \pi^{-1/2} \beta^{1/2} e^{-\beta} k_{ij} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda) k_{kl} \beta^{l/2} L_k^{l+1/2}(\beta) P_l(\lambda) = \\
&= \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \int_0^\infty d\beta \beta^{j+1/2} e^{-\beta} L_i^{j+1/2}(\beta) L_k^{l+1/2}(\beta) \int_{-1}^1 d\lambda P_j(\lambda) P_l(\lambda) = \\
&= \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \int_0^\infty d\beta \beta^{j+1/2} e^{-\beta} L_i^{j+1/2}(\beta) L_k^{l+1/2}(\beta) \delta_{jl} h_j h_l = \\
&= \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \delta_{jl} h_j h_l \int_0^\infty d\beta \beta^{j+1/2} e^{-\beta} L_i^{j+1/2}(\beta) L_k^{j+1/2}(\beta) = \\
&= \pi^{-1/2} k_{ij} k_{kl} \delta_{jl} h_j h_l \delta_{ik} p_i p_k, \tag{3.10}
\end{aligned}$$

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 obtienen* respectivamente de las Ecs. 3.5 y 3.6. Elijiendo los factores k_{ij} adecuadamente para que la expresión anterior valga la unidad**,

$$k_{ij} = \sqrt{\frac{i!(2j+1)\sqrt{\pi}}{2\Gamma(i+j+3/2)}}, \tag{3.11}$$

obtenemos una base de funciones ortonormales:

$$\langle J_{ij} | J_{kl} \rangle = \delta_{ik} \delta_{jl}. \tag{3.12}$$

Ahora podemos expresar \hat{f} como

$$|\hat{f}\rangle = \sum_{i,j} C_{ij} |J_{ij}\rangle, \tag{3.13}$$

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} .

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 la función de distribución a todo el espacio de velocidades. Recordando el elemento de volumen Ec. 2.11, tenemos***

$$n = \int dV_v f(v) = \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda \pi v_t^3 \beta^{1/2} K_M e^{-\beta} \hat{f}(\beta, \lambda) = \int_0^\infty d\beta \int_{-1}^1 d\lambda K(\beta) \hat{f}(\beta, \lambda);$$

*Hay 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 $L_i^{j+1/2}$.

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

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

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,

$$C_{ij} = \langle J_{ij}|\hat{f}\rangle. \quad (3.14)$$

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

$$\langle w \rangle = \langle w|\hat{f}\rangle. \quad (3.15)$$

Si podemos expresar w como combinación lineal de los J_{ij} , por la Ec. 3.14 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. 3.15, recordemos algunas definiciones (véase, p. ej., [3]):

- 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: $\mathbf{P} = \int d\mathcal{V}_v m\mathbf{v}\mathbf{v} f$.
- 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:

$$n = \langle 1 \rangle = \langle 1|\hat{f}\rangle \quad (3.16)$$

$$nu_{\parallel} = \langle v_{\parallel} \rangle = v_t \langle \beta^{1/2} \lambda | \hat{f} \rangle \quad (3.17)$$

$$nT = \frac{1}{3} m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{3} m v_t^2 \langle \beta | \hat{f} \rangle \quad (3.18)$$

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. 3.9 resultan

$$J_{00} = k_{00} L_0^{1/2} P_0 = k_{00} \quad (3.19)$$

$$J_{01} = k_{01} \beta^{1/2} L_0^{3/2} P_1 = k_{01} \beta^{1/2} \lambda \quad (3.20)$$

$$J_{10} = k_{10} L_1^{1/2} P_0 = k_{10} \left(\frac{3}{2} - \beta \right) \quad (3.21)$$

$$J_{11} = k_{11} \beta^{1/2} L_1^{1/2} P_1 = k_{11} \left(\frac{5}{2} - \beta \right) \beta^{1/2} \lambda, \quad (3.22)$$

tenemos:

$$1 = \frac{J_{00}}{k_{00}} \quad (3.23)$$

$$\beta^{1/2} \lambda = \frac{J_{01}}{k_{01}} \quad (3.24)$$

$$\beta = \frac{3}{2} - \frac{J_{10}}{k_{10}} \quad (3.25)$$

y, recordando la Ec. 3.14, las cantidades 3.16, 3.17 y 3.18 deben ser

$$n = \frac{C_{00}}{k_{00}} \quad (3.26)$$

$$u_{\parallel} = v_t \frac{C_{01}}{C_{00}} \frac{k_{00}}{k_{01}} \quad (3.27)$$

$$T = \frac{mv_t^2}{3} \left(\frac{3}{2} - \frac{k_{00}}{k_{10}} \frac{C_{10}}{C_{00}} \right) \quad (3.28)$$

Señalemos por último que para una función de distribución maxwelliana debe darse $F_M = n f_M = f_M \hat{f}$ (véase la ec. 3.1), es decir, $\hat{f} = n = C_{00} k_{00}$, en aparente contradicción con la Ec. 3.26 salvo que se cumpla, como es el caso, que $k_{00} = 1$.

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. 3.9, 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

$$|\hat{f}\rangle \approx \sum_{i=0}^{N_L} \sum_{j=0}^{N_P} C_{ij} |J_{ij}\rangle, \quad (3.29)$$

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. 3.29.

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 3.26–3.28 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 3.29. 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. 3.9 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. 3.7. 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 :

$$\begin{aligned} C_{lm}^* &= \sum_{ij} C_{ij} k_{ij} \langle P_m(\lambda) | P_j(\lambda) \rangle \langle k_{lm} \beta^{*m/2} L_l^{m+1/2}(\beta^*) | \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) \rangle = \\ &= \sum_{ij} \left(\frac{v_t^*}{v_t} \right)^j \delta_{mj} C_{ij} k_{ij} k_{lm} \langle \beta^{*m/2} L_l^{m+1/2}(\beta^*) | \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) \rangle = \\ &= \left(\frac{v_t^*}{v_t} \right)^m \sum_i C_{im} k_{im} k_{lm} \langle \beta^{*m} L_l^{m+1/2}(\beta^*) | L_i^{m+1/2}(\beta) \rangle. \end{aligned} \quad (3.30)$$

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. 3.28.

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. 3.1, a la que correspondería una velocidad térmica $v_t = v_{th}$), la intentamos describir numéricamente mediante una exponencial Ec. 3.2 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

$$\langle e^{\delta\beta} | J_{n0} \rangle = \int_{-1}^1 d\lambda \int_0^\infty d\beta \frac{\beta^{1/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\beta} k_{n0} L_n^{1/2}(\beta) e^{\delta\beta} = \frac{2k_{i0}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\beta \beta^{1/2} e^{-(1-\delta)\beta} L_n^{1/2}(\beta). \quad (3.31)$$

Podemos resolver esta integral usando la fórmula de Rodrigues* 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:

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

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

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

Sustituyendo este resultado y los coeficientes de normalización k_{n0} (Ec. 3.11) en la Ec. 3.31, 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

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

*En este párrafo usaremos fórmulas que pueden encontrarse en [18].

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

$$\delta < 1/2 \Rightarrow v_t > \frac{1}{\sqrt{2}}v_{th} \quad (3.32)$$

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 3.32 como orientativa de que no existe una dificultad intrínseca en usar $v_t \neq v_{th}$ para plasmas cuasimaxwellianos.

3.6. Expansión del término colisional

Como se ha dicho, usaremos el operador linealizado de la Ref. [16]. 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. 3.13 permite escribirlo así:

$$\mathcal{C}_{ab} = \mathcal{C}(f_a, f_b) \approx \mathcal{C}(F_{Ma}, F_{Mb}) + \sum_{ij} \left[\mathcal{C}(f_a^{ij}, F_{Mb}) + \mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{ij}) \right], \quad (3.33)$$

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. 3.8 o 3.13)

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

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

De la Ref. [16] queremos obtener las proyecciones del operador linealizado Ec. 3.33 sobre la base J_{ij} , pero la notación en la Ref. [16] es algo distinta de la nuestra y debemos interrelacionarlas, cosa que hacemos a continuación.

En [16] se expande la función de distribución de la siguiente manera:

$$f_\alpha(\mathbf{v}) = F_{M\alpha} \sum_{ij} \frac{1}{\sigma_i^j} L_k^{l+1/2}(v^2/v_t^2) P^j(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji} \quad (3.34)$$

donde $P^j(\mathbf{v})$ pertenece a la familia de *polinomios armónicos irreducibles* dependientes de las tres componentes del vector velocidad \mathbf{v} [9]. 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 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. 2.11). Vamos a eliminar esta dependencia en la Ec. 3.34 aprovechando la propiedad siguiente de los $P^j(\mathbf{v})$. Si θ es un ángulo acimutal en torno a un eje dado por el cursor cualquiera $\hat{\mathbf{b}}$, entonces

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

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

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

y el promedio al ángulo acimutal es

$$\int_0^{2\pi} d\theta P^j(\mathbf{v}/v) = 2\pi P_j(\cos\phi) P^j(\hat{\mathbf{b}}). \quad (3.35)$$

Los momentos del operador de colisión Ec. 3.33 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. 3.34:

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

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

$$\begin{aligned} f_\alpha(\beta, \lambda) &= F_{M\alpha} \sum_{i,j} \frac{1}{\sigma_i^j} L_k^{l+1/2}(\beta) \left[\frac{1}{2\pi} \int d\theta P^j(\mathbf{v}) \right] \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji} \\ &= n_\alpha f_{M\alpha} \sum_{i,j} \frac{1}{\sigma_i^j} \beta^{j/2} L_i^{j+1/2}(\beta) P_j(\lambda) P^j(\hat{\mathbf{b}}) \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Recordando ahora nuestra expansión de f_α (Ecs. 3.3 y 3.8),

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

y por comparación con la Ec. 3.36 obtenemos la relación de nuestros coeficientes Ec. 3.14 –para la especie α – con los de la referencia [16]:

$$C_{\alpha,ij} = \frac{n_\alpha}{k_{ij} \sigma_i^j} P^j(\hat{\mathbf{b}}) \cdot \mathbf{m}_\alpha^{ji}. \quad (3.37)$$

Según la Ref. [16], las distintas partes del sumatorio en la Ec. 3.33 pueden expresarse como

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

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

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. 3.35 para eliminar la dependencia acimutal:

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

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

La Ec. 3.37 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 $C_{b,ij}$:

$$\mathcal{C}(f_a^{ij}, F_{Mb}) = f_{Ma} C_{a,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(ji,0)} \quad (3.38)$$

$$\mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{ij}) = \left(\frac{n_a}{n_b} \right) f_{Ma} C_{b,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(0,ji)}. \quad (3.39)$$

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 2.13. 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 [24] o la referencia más aplicada [25].

4.1. Discretización espacial y distribución de magnitudes

La Ec. 2.13 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. 2.13. Existen en la literatura muchos métodos numéricos apropiados para resolver ecuaciones de este estilo [26] 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* [27, 28], 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 los nodos de interpolación de C y \mathbf{F} . En la Fig. 1 se muestra un ejemplo ilustrativo, en dos dimensiones, de distribución de nodos en una celda. Sea

$$\frac{\partial C(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = S(\mathbf{x}, t) \quad (4.1)$$

*Se encuentra en la literatura como *Spectral Difference Method*.

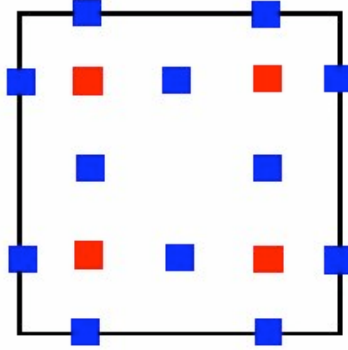


FIGURA 1. Ejemplo en 2D para interpolación con $N_p = 2$: en rojo se muestra la posición de los nodos que definen espacialmente la función f ; en azul, la posición de los nodos que definen el flujo. Se observa que algunos nodos del flujo están en la frontera, lo que permite compartirlos con los de otras celdas.

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. 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 un futuro informe.

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. 4.1, tenemos el siguiente conjunto de ecuaciones de evolución en cada celda i -ésima:

$$\frac{\partial C_{j,i}}{\partial t} + \sum_{k=1}^{N_p+1} \nabla m_{k,i} \cdot \mathbf{F}_{k,i} = S_{j,i}, \quad (4.2)$$

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. 4.2 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.

4.2. Separación de los términos de flujo

La Ec. 4.1 y el subsecuente esquema numérico exigen escindir la ecuación cinética en una suma de términos de “flujo” (los términos \mathbf{F} en 4.2) 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 $\nabla \cdot (\mathbf{v}_d f)$ (ver las Ecs. 2.13, 2.17 y 2.18), qué factores involucran sólo dependencias explícitas en \mathbf{x} y cuáles sólo en β y λ . Por un lado,

$$\nabla \cdot (f \mathbf{v}_d) = \nabla \cdot (f_M \hat{f} \mathbf{v}_d) = f_M \nabla \cdot (\hat{f} \mathbf{v}_d) + \hat{f} \mathbf{v}_d \cdot \nabla f_M. \quad (4.3)$$

Para pasar a la notación de \mathcal{P}_S (Ec. 3.29) 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. 3.7 del producto escalar, que es lo que convierte \hat{f} en f . El primer sumando en la expresión Ec. 4.3, quitando f_M , puede expresarse como

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

Para simplificar los desarrollos expresamos la velocidad de deriva (Ec. 2.18) como $\mathbf{v}_d = \sum_{k=1}^3 A_k(\mathbf{x}) B_k(\beta, \lambda)$. Recordando la expresión para las derivadas espaciales (Ec. 2.14), tenemos

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

y

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

de donde se tiene que

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

Evaluemos ahora el segundo sumando de la Ec. 4.3. 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

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

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. 4.3:

$$\nabla \cdot (f\mathbf{v}_d) \longrightarrow \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot (C_{ij} \mathbf{A}_k) \langle J_{lm} | B_k | J_{ij} \rangle +$$

$$2 \sum_{k=1}^3 C_{ij} \mathbf{A}_k \cdot \nabla \ln v_t \left[\langle J_{lm} | \beta (1 - \partial_\beta B_k) | J_{ij} \rangle - \langle J_{lm} | B_k \beta \partial_\beta | J_{ij} \rangle - \frac{3}{2} \langle J_{lm} | B_k | J_{ij} \rangle \right]. \quad (4.4)$$

Resumimos en el cuadro 1 algunas de las funciones que aparecen en la Ec. 4.4. 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 1. Funciones \mathbf{A}_k y B_k que aparecen en la Ec. 4.4.

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	$\beta(1 + \lambda^2)$	$\beta(1 + \lambda^2)$	$\beta^2(1 + \lambda^2)$	$\frac{1}{2} m v_t \frac{\mathbf{B} \times \nabla \mathbf{B}}{q B^3}$

En la Ec. 4.4 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 1) desaparecen por perpendicularidad. Lo mismo se aplica a $k = 2$ si el potencial electrostático es función de la superficie de flujo.

4.3. Evolución del desarrollo espectral

La evolución de las componentes C_{ij} (Ec. 3.14) tiene que deducirse de la Ec. de Boltzmann (Ec. 2.13), 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. 4.4. 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. 2.13 se obtiene directamente, pues los modos no dependen explícitamente del tiempo:

$$\partial_t f \rightarrow \partial_t \langle J_{lm} | \sum_{ij} C_{ij} | J_{ij} \rangle = \partial_t C_{lm}. \quad (4.5)$$

El término de “aceleraciones” pasa en el esquema numérico, como hemos visto arriba, a ser un término fuente. Según la Ec. 2.13 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. 3.29) y expresamos la derivada total en función de β y λ (Ec. 2.21). Entonces la expresión anterior resulta

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

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

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:

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

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

$$-C_{ij} \frac{2q}{mv_t^2} \mathbf{b} \cdot \mathbf{E} \left[\langle J_{lm} | \lambda \beta^{-1/2} |J_{ij}\rangle + \langle J_{lm} | \lambda \beta^{1/2} \partial_\beta |J_{ij}\rangle - \langle J_{lm} | \lambda \beta^{1/2} |J_{ij}\rangle \right]. \quad (4.6)$$

Pasemos ahora al término de derivación en λ . Procediendo similarmente, usamos la Ec. 2.22 para expresar $d\lambda/dt$ en función de β y λ y derivamos $f d\lambda/dt$. Así, obtenemos la transformación del término

$$-\frac{\partial}{\partial \lambda} \left(f(\mathbf{r}, \beta, \lambda) \frac{d\lambda}{dt} \right) \rightarrow$$

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

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

$$+C_{ij} v_t \nabla \ln B \cdot \mathbf{b} \left[-\langle J_{lm} | \lambda \beta^{1/2} |J_{ij}\rangle + \frac{1}{2} \langle J_{lm} | (1 - \lambda^2) \beta^{1/2} \partial_\lambda |J_{ij}\rangle \right]. \quad (4.7)$$

La ecuación de Vlasov en nuestro esquema numérico se obtiene al juntar la Ec. 4.5 y los sumatorios en los índices (i, j) de la Ec. 4.4 para el término de flujo con las Ecs. 4.6 y 4.7 para las aceleraciones. Obsérvese que se cancela la contribución de $\langle J_{lm} | \lambda \beta^{-1/2} |J_{ij}\rangle$ al añadir la Ec. 4.6 a la Ec. 4.7. Sólo falta añadir la parte colisional, que también se considera término fuente.

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. 3.38 y 3.39) 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. [16] vamos a expresar la proyección de las componentes de \mathcal{C}_{ab} explícitamente. En el desarrollo espectral necesitaremos los términos

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(f_a^{im}, F_{Mb}) \quad (4.8)$$

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{im}) \quad (4.9)$$

el primero de los cuales es, usando las Ecs. 2.10 y 3.9 para el elemento de volumen y para J_{im} respectivamente; y la Ec. 3.38:

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

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

Expresamos la proyección así porque en la Ref. [16] se dan fórmulas numéricas explícitas para los coeficientes:

$$A_{ab}^{mli} = n_a \int d\beta d\lambda \pi v_{ta}^3 \beta^{1/2} \beta^{m/2} L_i^{m+1/2}(\beta) f_{Ma} \nu_{ab}^{(mi,0)} \quad (4.10)$$

$$B_{ab}^{mli} = n_a \int d\beta d\lambda \pi v_{ta}^3 \beta^{1/2} \beta^{m/2} L_i^{m+1/2}(\beta) f_{Ma} \nu_{ab}^{(0,mi)}, \quad (4.11)$$

de manera que podemos escribir la proyección Ec. 4.8 así:

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(f_a^{im}, F_{Mb}) = \frac{1}{2m+1} A_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{a,im}}{n_a}. \quad (4.12)$$

Procediendo igualmente pero usando B_{ab}^{mli} en la Ec. 4.9, tenemos

$$\int d\mathbf{v} J_{lm}(\beta, \lambda) \mathcal{C}(F_{Ma}, f_b^{im}) = \frac{1}{2m+1} B_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{b,im}}{n_b}. \quad (4.13)$$

Usando el kernel Ec. 3.7 podemos expresar estos resultados de la siguiente manera:

$$\langle J_{lm} | C_{a,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(ji,0)} \rangle = \frac{1}{2m+1} A_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{a,im}}{n_a} \quad (4.14)$$

$$\langle J_{lm} | C_{b,ij} k_{ij} P_j(\lambda) \nu_{ab}^{(0,ji)} \rangle = \frac{1}{2m+1} B_{ab}^{mli} k_{lm} k_{im} \frac{C_{b,im}}{n_b}. \quad (4.15)$$

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. 3.14)
- Funciones dinámicas macroscópicas: $\langle g(\beta, \lambda) \rangle = \langle g(\beta, \lambda) | \hat{f}(\beta, \lambda) \rangle$ (Ec. 3.15)
- Proyecciones: $\langle J_{ij}(\beta, \lambda) | g(\beta, \lambda) \rangle$ (Ec. 3.7)

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. 3.4 y 3.29) 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. 3.7), tendremos integrales

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

$$= \frac{k_{ij}}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\beta e^{-\beta} \beta^{j+1/2} L_i^{j+1/2}(\beta) \beta^{-j/2} \int_{-1}^1 d\lambda P_j(\lambda) g(\beta, \lambda). \quad (4.16)$$

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

$$w_i^P = \frac{\|P_{N_P}(\lambda)\|^2}{P_{N_P}(\alpha_i^P) [\partial_\lambda P_{N_P+1}](\alpha_i^P)} \quad (4.17)$$

donde $\|\cdots\|$ es la norma (Ec. 3.6); 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. 3.5 la expresión de la norma):

$$w_k^L = \frac{\|L_{N_L}(\beta)\|^2}{L_{N_L}^{j+1/2}(\alpha_k^L) [\partial_\beta L_{N_L+1}^{j+1/2}](\alpha_k^L)}. \quad (4.18)$$

Con esto podemos resolver la integral 4.16 mediante los sumatorios

$$\langle g(\beta, \lambda) | J_{ij}(\beta, \lambda) \rangle = \frac{k_{ij}}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{N_L} \sum_{l=0}^{N_P} w_k^L w_l^P \frac{L_i^{j+1/2}(\alpha_k^L)}{(\alpha_k^L)^{j/2}} P_j(\alpha_l^P) g(\alpha_k^L, \alpha_l^P). \quad (4.19)$$

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

$$C_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{k_{ij}}{\sqrt{\pi}} \sum_{k=0}^{N_L} \sum_{l=0}^{N_P} w_k^L w_l^P \frac{L_i^{j+1/2}(\alpha_k^L)}{(\alpha_k^L)^{j/2}} P_j(\alpha_l^P) \hat{f}(\mathbf{x}, \alpha_k^L, \alpha_l^P). \quad (4.20)$$

5. Resumen

Se está desarrollando un código tridimensional 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 debe ser 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. Como mínimo, el código debe describir el transporte neoclásico en estas condiciones, pero su diseño no excluye la inclusión de fenómenos de turbulencia.

El transporte se describe haciendo evolucionar la función de distribución de una o varias especies del plasma en geometría toroidal arbitraria y hallando los correspondientes momentos. Las aproximaciones 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.

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 este informe, primero de una serie que pretende documentar todos los aspectos del proyecto, se ha expuesto la base teórica que justifica la manera en que el código integra la ecuación cinética: se describen el tratamiento de las funciones de distribución –mediante expansión en sus momentos– y los ingredientes fundamentales del esquema numérico.

En un informe posterior se entrará en los detalles de la implementación numérica. En concreto, se revisará con cuidado la cuestión de la normalización de la temperatura, que, como ya se ha comentado (ver el § 3.4), es uniforme en regiones del espacio y exige hacer transformaciones de la función de distribución en las fronteras entre regiones. También se

detallará la herramienta de generación de mallas adaptadas a la geometría magnética gracias al seguimiento de líneas de campo y se expondrán otros aspectos importantes de la resolución numérica: la estabilización de la convección por medio de *solvers* de Rusanov y Roe en las fronteras entre elementos de la malla, el avance temporal, el modo de alcanzar estacionarios, la paralelización, las condiciones de contorno etc.

Referencias

1. C. Alejaldre *et al.*, *TJ-II Project: A flexible Helic Stellerator*, Fusion Technol. **17**, 131 (1990).
2. V. I. van Rij, S. P. Hirschmann, *Variational bounds for transport coefficients in three-dimensional toroidal plasmas*, Phys. Fluids B **1**, 563 (1988).
3. F. L. Hinton, R. D. Hazeltine, *Theory of plasma transport in toroidal confinement systems*, Rev. Mod. Physics **48**(2), 239 (1976).
4. A. H. Boozer, *Physics of magnetically confined plasmas*, Rev. Mod. Phys. **76** (4), 1071–1141 (2004).
5. 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** (2004) 172–180
6. 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) 5582–5609 (2008).
7. A. J. Brizard, T. S. Hahm, *Foundations of nonlinear gyrokinetic theory*, Rev. Mod. Phys. **79**, 421 (2007).
8. M. Rosenbluth, A. N. Kaufman, *Plasma diffusion in a magnetic field*, Phys. Rev. **1**, 1 (1958).
9. R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 1. Classical transport theory*, North Holland 1988.
10. R. Balescu, *Transport processes in plasmas, part 2. Neoclassical transport theory*, North Holland 1988.
11. R. Balescu, *Statistical Dynamics: Matter Out of Equilibrium*, Imperial College Press 1997, 350 pp.
12. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Physical Kinetics* (Pergamon, New York, 1976).
13. K. Nishikawa, M. Wakatani, *Plasma Physics: basic theory with fusion applications*, Springer series on atoms and plasmas, Springer-Verlag, Berlin Heilderberg 1990, 312 p.
14. F. Chen, *Introduction to plasma physics and controlled fusion*, Plenum Press, New York.
15. S. I. Braginskii in: M.A. Leontovich (Ed.), *Transport Processes in a Plasma*, Reviews of Plasma Physics, Consultants Bureau, New York, 1965, p. 205–311.
16. J. Y. Ji, E. D. Held, *Exact linearized Coulomb collision operator in the moment expansion*, Phys. Plasmas **13**, 102103 (2006)
17. S. P. Hirschmann, D. J. Sigmar, *Approximate Fokker–Planck collision operator for transport theory applications*, Phys. Fluids **19**, 1532 (1978).
18. 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.
19. G. Szegő, *Orthogonal polynomials*, ISBN 0821810235, American Mathematical Society 1975, 432 páginas.
20. D. Jackson, *Fourier Series and Orthogonal Polynomials*, Courier Dover Publications (Mathematics) 2004, ISBN 0486438082, 234 pp.
21. http://en.wikipedia.org/wiki/Orthogonal_polynomials
22. W. E. Weisstein, *Laguerre Polinomial*. From *MathWorld*—A Wolfram Web Resource (1999), <http://mathworld.wolfram.com/LaguerrePolynomial.html>.
23. W. E. Weisstein, *Legendre Polinomial*. From *MathWorld*—A Wolfram Web Resource (1999), <http://mathworld.wolfram.com/LegendrePolynomial.html>.
24. K. E. Aitken, W. Han, *Theoretical Numerical Analysis: A Functional Analysis Framework*, ISBN 0387951423, Springer 2001, 450 pp.
25. A. Ralston, P. Rabinowitz, *A first course in numerical analysis*, ISBN 048641454X, Courier Dover Publications (Mathematics) 2001, 556 pp.
26. J. A. Ekaterinaris, *High-order accurate, low numerical diffusion methods for aerodynamics*, Progress in Aerospace Sciences **41** 192–300 (2005).
27. 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, July 12-16, 2004, Toronto, Canada. Springer, 2004.
28. Y. Liu, M. Vinokur, Z. J. Wang, *Spectral difference method for unstructured grids I: Basic formulation*, J. Comp. Phys. **216**, 780 (2006).

