

PROYECTO INTEGRADOR DE LA CARRERA DE  
INGENIERÍA NUCLEAR

DESARROLLO DE UN CÓDIGO DE CENTRO DE GIRO  
PARA ESTUDIO DE TRANSPORTE EN REACTORES  
DE FUSIÓN NUCLEAR

**Agustín Gallo Claussi**  
Estudiante de grado

**Dr. Hugo Emilio Ferrari**  
Director

**Miembros del Jurado**

Dr. Pablo García Martínez (Instituto Balseiro)

Dr. José González (Instituto Balseiro)

25 de julio de 2023

Fusión Nuclear y Física de Plasmas – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro  
Universidad Nacional de Cuyo  
Comisión Nacional de Energía Atómica  
Argentina

(Biblioteca Leo Falicov CAB-IB)

Inventario 24789  
03/08/2023  
Biblioteca Leo Falicov

A mi madre y a mi padre.



# Índice de contenidos

Índice de contenidos	v
Índice de figuras	vii
Índice de tablas	xi
Resumen	xiii
Abstract	xv
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Fusión nuclear . . . . .	1
1.1.1. Sección eficaz y tasa de fusión . . . . .	2
1.2. Física de plasmas . . . . .	4
1.2.1. Parámetros de un plasma . . . . .	4
1.3. Métodos de confinamiento . . . . .	5
1.3.1. Tokamaks . . . . .	6
1.3.1.1. Superficies magnéticas . . . . .	6
1.3.1.2. Potencia de fusión . . . . .	7
1.4. Motivación . . . . .	9
<b>2. Dinámica de partículas cargadas</b>	<b>11</b>
2.1. Dinámica de partículas cargadas en campos electromagnéticos . . . . .	11
2.1.1. Campo eléctrico nulo y campo magnético uniforme . . . . .	11
2.1.2. Campo eléctrico nulo y gradientes de campo magnético . . . . .	13
2.1.3. Tipos de órbitas en tokamaks . . . . .	14
2.2. Colisiones elásticas . . . . .	15
2.3. Distribución de frenamiento . . . . .	17
<b>3. Códigos de partículas</b>	<b>19</b>
3.1. Código OC . . . . .	19
3.1.1. Operador de colisiones elásticas OC . . . . .	21

---

3.2. Código CG . . . . .	22
3.2.1. Operador de colisiones elásticas CG . . . . .	25
3.3. Generador de partículas originadas por fusión . . . . .	27
3.3.1. Implementación de la distribución de frenamiento . . . . .	27
3.4. Paralelización de los códigos . . . . .	28
<b>4. Simulaciones computacionales</b>	<b>31</b>
4.1. Condiciones de las simulaciones . . . . .	31
4.2. Trayectorias en ausencia de colisiones . . . . .	32
4.2.1. Problema de la separatriz . . . . .	34
4.3. Validación del operador de colisiones elásticas . . . . .	35
4.3.1. Código OC . . . . .	35
4.3.2. Código CG . . . . .	35
4.4. Trayectorias en presencia de colisiones . . . . .	36
4.4.1. Distribución energética . . . . .	39
4.4.2. Distribución en pitch . . . . .	41
4.5. Distribución estacionaria de partículas $\alpha$ de fusión . . . . .	42
4.5.1. Utilizando la distribución de frenamiento como condición inicial	42
4.5.2. Sin utilizar la distribución de frenamiento como condición inicial	47
4.6. Trabajo futuro . . . . .	49
<b>5. Conclusiones</b>	<b>51</b>
<b>A. Práctica profesional supervisada (PPS) y actividades de proyecto y diseño (P&amp;D)</b>	<b>53</b>
A.1. Práctica profesional supervisada (PPS) . . . . .	53
A.2. Actividades de proyecto y diseño (P&D) . . . . .	53
<b>Bibliografía</b>	<b>55</b>

# Índice de figuras

1.1. Energía de ligadura (enlace) promedio por nucleón en función del número de nucleones [1]. . . . .	2
1.2. Sección eficaz $\sigma$ de las reacciones $^2H-^3H$ , $^2H-^2H$ y $^2H-^3He$ en función de la energía del deuterón [2]. . . . .	3
1.3. Esquema de un reactor tokamak para fusión nuclear mediante confinamiento magnético [3]. . . . .	6
1.4. Superficies de flujo y líneas de campo magnético en un tokamak con sección poloidal circular [4]. . . . .	7
2.1. Trayectoria de una partícula cargada positivamente en un campo magnético uniforme [5]. . . . .	12
2.2. Proyección poloidal de órbitas pasante y atrapada en un tokamak de sección poloidal circular [6]. . . . .	14
3.1. Eje magnético, radio menor $a$ y superficies de flujo para un tokamak de sección poloidal circular [7]. . . . .	20
3.2. Comparación entre los tiempos de cómputo $t_c$ obtenidos con el código FOCUS (OC) en sus versiones de CPU y de GPU en función del tiempo de simulación $t_s$ [6]. . . . .	28
4.1. Distribución espacial inicial de las partículas simuladas. . . . .	32
4.2. Distribución en pitch inicial de las partículas simuladas. . . . .	32
4.3. Trayectoria de una partícula atrapada calculada con ambos códigos en ausencia de colisiones. . . . .	33
4.4. Trayectoria de una partícula perdida únicamente en el código OC, calculada con ambos códigos en ausencia de colisiones. . . . .	34
4.5. Trayectoria de la partícula atrapada mostrada en la figura 4.3, calculada ahora con ambos códigos en presencia de colisiones. . . . .	37
4.6. Evolución temporal de la energía cinética promedio de las partículas simuladas no perdidas calculada con ambos códigos en presencia de colisiones durante un tiempo de 100 ms. . . . .	38

4.7. Distribución espacial de las partículas simuladas con el código CG luego de 100 ms en presencia de colisiones. . . . .	38
4.8. Distribución en pitch de las partículas simuladas con el código CG luego de 100 ms en presencia de colisiones. . . . .	39
4.9. Distribución energética de las partículas simuladas con el código CG en presencia de colisiones al transcurrir 10 ms, 40 ms y 100 ms . . . . .	39
4.10. Distribución energética de las partículas simuladas con el código CG en presencia de colisiones luego de 100 ms junto con una curva Maxwelliana de ajuste para un plasma de 2,5 keV. . . . .	40
4.11. Distribución energética de las partículas simuladas con el código CG en presencia de colisiones luego de 100 ms junto con curvas Maxwellianas de ajuste para plasmas de 2,2 keV, 2,5 keV y 2,8 keV. . . . .	41
4.12. Gráfico pitch-energía calculado con el código CG en presencia de colisiones utilizando cinco salidas de datos equiespaciadas temporalmente entre 10 ms y 50 ms. . . . .	42
4.13. Gráfico pitch-energía calculado con el código CG en presencia de colisiones utilizando diez salidas de datos equiespaciadas temporalmente entre 10 ms y 100 ms. . . . .	42
4.14. Perfiles de temperatura y densidad de los electrones en función de la coordenada de flujo poloidal utilizados para el estudio de la distribución de frenamiento. Además, se grafica la tasa de fusión $S$ . . . . .	43
4.15. Distribución en $\rho_\psi$ inicial de las partículas $\alpha$ generadas con la tasa de fusión $S$ . . . . .	43
4.16. Distribución energética inicial de las partículas $\alpha$ generadas. La velocidad $v$ se normalizó con el valor $v_0$ correspondiente a un energía de 3,54 MeV y se incluye la distribución de frenamiento calculada analíticamente. . . . .	43
4.17. Evolución temporal de los valores promedios de energía, tasa de reposición, $\rho_\psi$ y pitch del conjunto de partículas $\alpha$ simuladas. . . . .	44
4.18. Proyección poloidal de las distribuciones inicial y final de las partículas $\alpha$ simuladas. . . . .	45
4.19. Distribución en pitch inicial y final de las partículas $\alpha$ simuladas. . . . .	46
4.20. Distribución en $\rho_\psi$ inicial y final de las partículas $\alpha$ simuladas. . . . .	46
4.21. Distribución energética inicial y final de las partículas $\alpha$ simuladas. La velocidad se normalizó con el valor $v_0$ correspondiente a un energía de 3,54 MeV. . . . .	46
4.22. Distribución energética de las partículas $\alpha$ simuladas sin utilizar la distribución de frenamiento (DF) como condición inicial a tiempos 0 (fuera de escala), 100 ms y 500 ms. La velocidad se normalizó con el valor $v_0$ correspondiente a un energía de 3,54 MeV. . . . .	47



- 
- 4.23. Distribución energética de las partículas  $\alpha$  simuladas sin utilizar la distribución de frenamiento (DF) como condición inicial luego de 1 s y 2 s. La velocidad se normalizó con el valor  $v_0$  correspondiente a un energía de 3,54 MeV. . . . . 48
- 4.24. Distribución energética de las partículas  $\alpha$  simuladas sin utilizar la distribución de frenamiento (DF) como condición inicial luego de 3 s. Se compara con el resultado obtenido previamente (figura 4.21). La velocidad se normalizó con el valor  $v_0$  correspondiente a un energía de 3,54 MeV. . . . . 48



# Índice de tablas

4.1. Simulación de 1 ms con ambos códigos en ausencia de colisiones. . . . .	33
4.2. Comparación del tiempo de simulación obtenido utilizando el término determinístico del operador de colisiones OC con respecto al cálculo numérico. . . . .	35
4.3. Comparación del tiempo de simulación obtenido utilizando el término determinístico del operador de colisiones CG con respecto al cálculo numérico. . . . .	36
4.4. Simulación de 1 ms con ambos códigos en presencia de colisiones. . . . .	36
4.5. Simulación de 100 ms con ambos códigos en presencia de colisiones. . . . .	37



# Resumen

Los códigos de partículas utilizados en el área de física de plasmas simulan el movimiento que realiza una partícula cargada en un campo electromagnético determinado. Se dividen en dos grandes categorías, los códigos de órbita completa (OC) y los de centro de giro (CG). Los primeros resuelven la trayectoria real que describe una partícula mientras que los segundos calculan exclusivamente el movimiento de su centro de giro. Más allá de la pérdida de precisión con relación a la posición de la partícula, la ventaja de los códigos CG se establece en el hecho de que son menos demandantes computacionalmente.

En este trabajo se desarrolló un código CG con un operador de colisiones elásticas que tiene la capacidad de ser ejecutado en procesadores gráficos. Con este objetivo, se utilizó una versión sin colisiones previamente elaborada por Aguirre [8] sobre la cual se implementó un operador de colisiones elásticas de acuerdo al cálculo teórico de Chen [9], posibilitando las colisiones entre las partículas simuladas y un plasma de fondo compuesto por distintas especies.

El código CG fue sometido a distintas etapas de validación, en las cuales se recurrió a un código OC realizado por Clauser y denominado FOCUS [6] a modo de comparación. Todos los resultados obtenidos verificaron el correcto funcionamiento del código CG y su operador de colisiones elásticas. Por lo tanto, el mismo se empleó para estudiar la variación en el tiempo de la energía y el pitch de un conjunto de partículas determinado con condiciones iniciales arbitrarias. Además, se aseguró la compatibilidad entre ambos códigos, en vista de poder combinarlos en una versión CG-OC en el futuro.

Finalmente, se analizó la distribución de frenamiento de una población de partículas  $\alpha$  nacidas de fusión en un plasma con los parámetros de ITER [10]. La evolución temporal observada coincidió con los resultados de FOCUS y se demostró la ventaja del código CG con respecto a los tiempos de cómputo.

**Palabras clave:** FUSIÓN NUCLEAR, FÍSICA DE PLASMAS, CÓDIGOS DE PARTÍCULAS, CENTRO DE GIRO, SIMULACIONES COMPUTACIONALES.



# Abstract

Particle codes utilized in the field of plasma physics simulate the motion of a charged particle within a specific electromagnetic field. They are divided into two main categories, full orbit codes (OC) and guiding center codes (CG). OC codes solve the actual trajectory described by a particle, while CG codes only calculate the motion of its guiding center. Beyond the loss of precision concerning the particle's position, the advantage of CG codes is established in the fact that they are less computationally demanding.

In this work, a CG code with an elastic collision operator was developed with the capacity of being executed on graphics processing units. To achieve this objective, a previous version without collisions implemented by Aguirre [8] was utilized, upon which an elastic collision operator based on the theoretical derivation by Chen [9] was incorporated, enabling collisions between the simulated particles and a background plasma consisting of different species.

The CG code underwent a series of validation stages and a comparative analysis was conducted with an OC code named FOCUS, developed by Clauser [6]. All the obtained results confirmed the proper functioning of the CG code and its elastic collision operator. Therefore, it was employed to study the temporal variation of the energy and pitch of a specific particle ensemble with arbitrary initial conditions. Moreover, compatibility between both codes was guaranteed, with the purpose of combining them into a CG-OC version in the future.

Finally, the slowing down distribution function for fusion-born  $\alpha$  particles was analyzed in an ITER-like plasma [10]. The observed time evolution matched the results from FOCUS and the advantage of the CG code in terms of computing times was demonstrated.

**Keywords:** NUCLEAR FUSION, PLASMA PHYSICS, PARTICLE CODES, GUIDING CENTER, COMPUTATIONAL SIMULATIONS.





# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Fusión nuclear

La energía involucrada en una reacción nuclear es proporcional a la diferencia de masas entre los productos y los reactivos, verificando:

$$E = \Delta mc^2. \quad (1.1)$$

En donde  $E$  es la energía liberada o absorbida,  $\Delta m$  es el cambio en la masa y  $c$  es el valor de la velocidad de la luz en el vacío. La fusión nuclear es el proceso mediante el cual dos o más núcleos atómicos se unen para formar uno más pesado. En particular, si los reactivos son livianos, existe el potencial para la liberación de una gran cantidad de energía.

La energía de ligadura nuclear  $B_{nucleo}$  se corresponde con la mínima energía necesaria para separar un núcleo en sus constituyentes. Es posible calcularla como:

$$B_{nucleo} = (Zm_P + Nm_N - m_{nucleo})c^2. \quad (1.2)$$

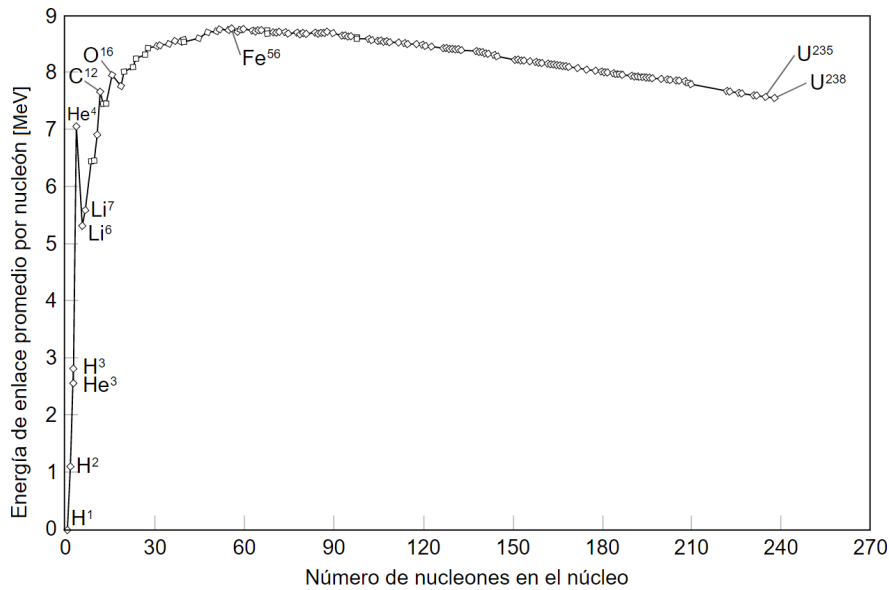
Siendo  $Z$  el número atómico,  $N$  la cantidad de neutrones, y  $m_P$ ,  $m_N$  y  $m_{nucleo}$ , las masas del protón, del neutrón y del núcleo, respectivamente. Resulta interesante observar la energía de ligadura por nucleón, la cual se presenta en la figura 1.1 en función del número de nucleones.

Una de las reacciones más estudiadas es la fusión de un deuterón (núcleo de  ${}^2H$ ) y un tritón (núcleo de  ${}^3H$ ):



A partir de la cual se obtienen como productos un núcleo de helio o partícula  $\alpha$  ( ${}^4He$ ) y un neutrón ( $n$ ). Dicha reacción produce una liberación de energía, o sea,  $Q > 0$ .

Las ecuaciones 1.1 y 1.2 son útiles para cuantificar la energía involucrada en la



**Figura 1.1:** Energía de ligadura (enlace) promedio por nucleón en función del número de nucleones [1].

reacción 1.3. Es posible calcular  $Q$  directamente como la diferencia entre la energía de ligadura de los productos y la de los reactivos. En este caso, de la figura 1.1, aproximadamente:

- $B_{2H} = 2,2 \text{ MeV}$ .
- $B_{3H} = 8,5 \text{ MeV}$ .
- $B_{4He} = 28,3 \text{ MeV}$ .

Por lo tanto,

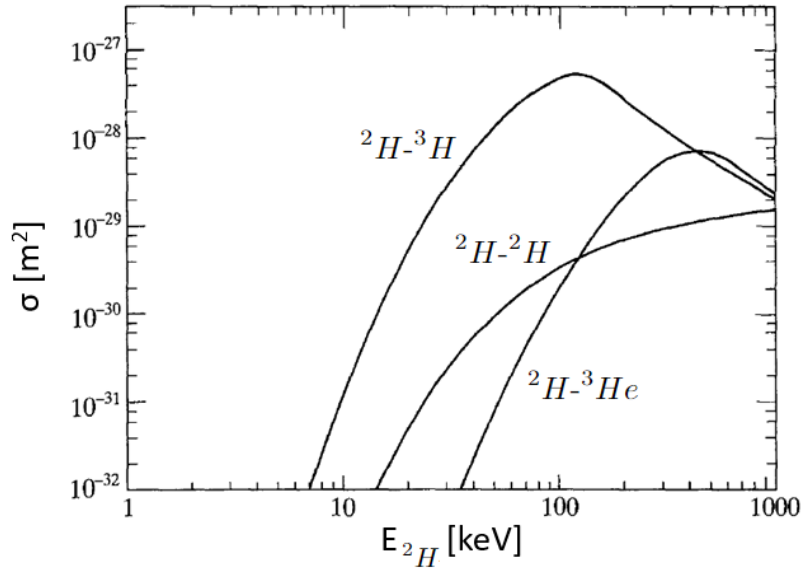
$$Q = B_{4He} - (B_{2H} + B_{3H}) = 17,6 \text{ MeV}. \quad (1.4)$$

Con este ejemplo, queda demostrada la practicidad de la figura 1.1 para un cálculo inmediato de la energía asociada a una determinada reacción nuclear. Además, la elevada pendiente que exhibe al comienzo, para un número de nucleones pequeño, indica la posibilidad de una vasta liberación de energía en la fusión de núcleos livianos.

### 1.1.1. Sección eficaz y tasa de fusión

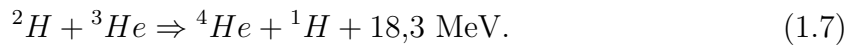
La sección eficaz de una reacción es una medida de la probabilidad de que esta ocurra. Cuanto mayor sea la sección eficaz, mayor será la probabilidad de interacción. Es de suma importancia ya que la fusión ocurre por colisiones entre partículas. Por esto, los núcleos deben acercarse lo suficiente para que la fuerza nuclear fuerte sea de magnitud considerable, venciendo la repulsión electrostática. Sin embargo, no es

necesario superar estrictamente la barrera coulumbiana gracias a la ayuda del efecto túnel mecánico cuántico.



**Figura 1.2:** Sección eficaz  $\sigma$  de las reacciones  ${}^2\text{H}-{}^3\text{H}$ ,  ${}^2\text{H}-{}^2\text{H}$  y  ${}^2\text{H}-{}^3\text{He}$  en función de la energía del deuterón [2].

La dependencia de la sección eficaz  $\sigma$  con la energía se expone en la figura 1.2, en donde queda claro la preferencia con respecto a la fusión de  ${}^2\text{H}$  y  ${}^3\text{H}$ . También se muestran las reacciones:



La fusión entre deuterones deriva en las ecuaciones 1.5 y 1.6 con un 50 % de probabilidad en cada una. Cabe destacar que la energía liberada se manifiesta en la forma de energía cinética de los productos considerando un balance de momento. Por ejemplo, en la fusión de un deuterón y un tritón (ecuación 1.3), los 17,6 MeV se reparten aproximadamente en 3,54 MeV para  ${}^4\text{He}$  y 14,06 MeV para  $n$ .

Por otro lado, dado un plasma (sección 1.2) compuesto por  ${}^2\text{H}$  y  ${}^3\text{H}$ , y asumiendo una distribución energética Maxwelliana, la tasa de reacciones de fusión por unidad de volumen  $S_V$  puede expresarse como:

$$S_V = n_{2H}n_{3H}\langle\sigma v\rangle_{2H^3H}. \quad (1.8)$$

En donde  $n_{2H}$  y  $n_{3H}$  son las densidades de  ${}^2\text{H}$  y  ${}^3\text{H}$ , respectivamente, y  $\langle\sigma v\rangle_{2H^3H}$  es el promedio del producto entre la sección eficaz y la velocidad, y se denomina la reactividad de la reacción.

## 1.2. Física de plasmas

El máximo en la sección eficaz de fusión entre  $^2H$  y  $^3H$  se encuentra alrededor de los 100 keV de energía, como se observa en la figura 1.2. La equivalencia entre una determinada energía y su temperatura asociada se obtiene a través de la constante de Boltzmann  $k$ , de la siguiente manera:

$$E = kT. \quad (1.9)$$

Con  $k = 8,6173 * 10^{-5}$  eV/K. Para  $E = 100$  keV, resulta  $T = 1,1605 * 10^9$  K, o sea, una temperatura del orden de los mil millones de K, rango en el cual las partículas se encuentran en un estado de plasma.

Es habitual en este ámbito referirse a la temperatura en términos de energía, por ejemplo, una temperatura de 10 keV significa en realidad que la energía es de 10 keV. En caso de ser oportuno, la conversión a dimensiones propias de temperatura se puede realizar directamente a través de la ecuación 1.9.

Se denomina plasma al cuarto estado de agregación de la materia. Se lo caracteriza como un fluido, con propiedades similares a las de un gas, pero ionizado. En caso de estar completamente ionizado, se compone exclusivamente por iones y electrones. Por lo tanto, existe la posibilidad de utilizar campos magnéticos para su confinamiento (sección 1.3).

### 1.2.1. Parámetros de un plasma

Al igual que los gases, los plasmas pueden ser descritos en función de su densidad y temperatura. No obstante, existen ciertos parámetros propios de este estado, como por ejemplo, la longitud de Debye y la frecuencia del plasma.

Dado un plasma completamente ionizado, cada partícula en el mismo se encuentra rodeada por otras partículas cargadas, de modo que el potencial eléctrico es una superposición del generado por cada carga individual. Suponiendo una distribución Maxwelliana, es posible estimar la distancia a la cual el potencial producido por una carga se ve apantallado por el resto. Esta distancia se conoce como la longitud de Debye  $\lambda_D$ , a partir de la cual se considera el efecto colectivo del plasma:

$$\lambda_D = \left[ 4\pi \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2 n_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right]^{-1/2}. \quad (1.10)$$

Donde la sumatoria se realiza sobre todas las especies  $\alpha$  que forman parte del plasma, y  $q_{\alpha}$ ,  $n_{\alpha}$  y  $T_{\alpha}$ , son sus valores de carga eléctrica, densidad y temperatura, respectivamente.

Por otro lado, la concentración de cargas existente es de tal magnitud que, ante una perturbación, el movimiento de iones y electrones tiende a neutralizar el plasma.

En general, debido a la diferencia de masa, se suele considerar que los electrones se mueven mientras que los iones se mantienen estacionarios.

Entonces, si en una región del plasma se produce una perturbación, los electrones se desplazan bajo la influencia del campo eléctrico con el objetivo de neutralizar nuevamente el plasma. Sin embargo, debido a la inercia de los mismos, no logran detenerse en la posición de equilibrio, y acaban causando un campo eléctrico opuesto al original. En consecuencia, van a realizar un movimiento oscilatorio con una frecuencia denominada como la frecuencia del plasma  $\omega_p$ :

$$\omega_p = \left[ 4\pi \frac{q_e^2 n_e}{m_e} \right]^{1/2}. \quad (1.11)$$

Siendo  $q_e$ ,  $n_e$  y  $m_e$ , la carga eléctrica, densidad y temperatura de los electrones, respectivamente.

### 1.3. Métodos de confinamiento

La forma más efectiva de generar energía a partir de la fusión nuclear consiste en el calentamiento de los reactivos hacia rangos en los que la sección eficaz de la reacción sea apreciable, lo que se conoce como fusión termonuclear. Las estrellas se valen de su gran cantidad de masa para comprimir las partículas y lograr las condiciones necesarias de presión y temperatura para la fusión en su núcleo.

En la tierra, no es factible replicar el confinamiento gravitatorio de las estrellas. En general, se busca alcanzar una temperatura promedio en torno a los 10 keV, considerando que la mayor parte de las fusiones vendrá de la “cola” energética de la Maxwelliana. A estas temperaturas, es imposible utilizar paredes materiales para confinar el plasma por lo que se requieren otras formas de lograrlo. En este sentido, los dos métodos más desarrollados son el confinamiento magnético y el confinamiento inercial.

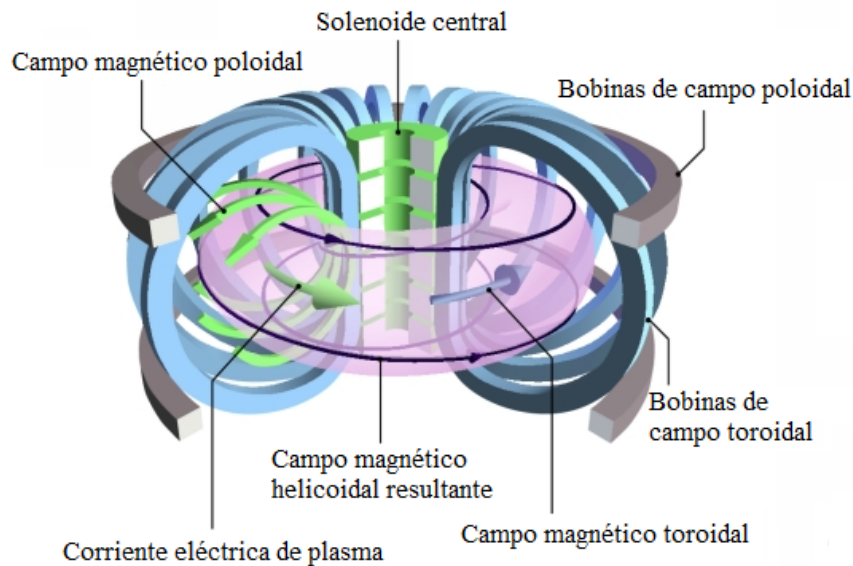
El confinamiento magnético utiliza campos magnéticos para guiar las partículas cargadas dentro de un reactor y de esta manera confinar el plasma. Se procura evitar el contacto con las paredes debido a que produciría un enfriamiento del plasma y un deterioro de la cámara. Los reactores más difundidos en el mundo son el tokamak (apartado 1.3.1) y el stellerator.

El confinamiento inercial implica la compresión y el calentamiento de blancos de combustible hasta condiciones de fusión. Para esto, emplea láseres potentes que entregan energía simultáneamente sobre pequeñas cápsulas combustibles. Se caracteriza por ser un régimen de tipo explosivo.

### 1.3.1. Tokamaks

El término tokamak es un acrónimo ruso que significa “cámara toroidal con bobinas magnéticas”. Se trata de un dispositivo diseñado con el fin de lograr la fusión nuclear mediante el método de confinamiento magnético, siendo uno de los conceptos más prometedores con respecto al dominio de la tecnología de fusión por parte de la humanidad.

Se esquematiza un tokamak en la figura 1.3. El reactor presenta una forma geométrica similar a la de toroide, con simetría axial. Se distinguen dos direcciones principales; la toroidal, a lo largo del toroide encerrando el vacío central, y la poloidal, alrededor del mismo bordeando la superficie.



**Figura 1.3:** Esquema de un reactor tokamak para fusión nuclear mediante confinamiento magnético [3].

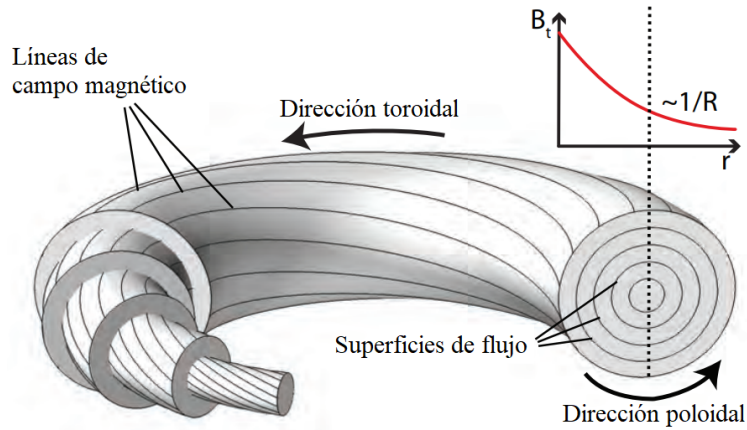
La generación de los campos magnéticos se ejecuta por medio de un conjunto de bobinas. Las bobinas de campo toroidal tienen forma de  $D$  y son las encargadas de producir el campo magnético toroidal, componente fundamental en el confinamiento de las partículas cargadas. Las bobinas de campo poloidal se utilizan para controlar el posicionamiento del plasma y modificar su configuración espacial. Por otro lado, se puede pensar que el solenoide central actúa como el circuito primario de un transformador, ya que a través de una variación de flujo magnético induce un campo eléctrico toroidal (por Ley de inducción de Faraday), ocasionando una corriente toroidal.

#### 1.3.1.1. Superficies magnéticas

En un tokamak, la superposición entre el campo magnético toroidal creado por las bobinas de campo toroidal, y el campo magnético poloidal inducido por la circulación

de la corriente eléctrica de plasma (por Ley de Biot-Savart), deviene en un campo magnético resultante helicoidal. A su vez, considerando un equilibrio axisimétrico, las líneas de campo magnético forman superficies magnéticas anidadas, también conocidas como superficies de flujo, en donde la presión del plasma es constante.

Se ilustran las líneas de campo magnético y las superficies de flujo en la figura 1.4. Además, por medio de la Ley de Ampère, se calcula que la intensidad del campo magnético toroidal disminuye con la inversa del radio.



**Figura 1.4:** Superficies de flujo y líneas de campo magnético en un tokamak con sección poloidal circular [4].

Debido al veloz transporte que ocurre de manera paralela a las líneas de campo magnético, existen cantidades como la densidad y la temperatura del plasma que se asumen constantes a lo largo de una determinada superficie de flujo. Esto motiva la definición de la coordenada de flujo poloidal  $\rho_\Psi$ :

$$\rho_\Psi = \left[ \frac{\Psi - \Psi_m}{\Psi_s - \Psi_m} \right]^{1/2}. \quad (1.12)$$

En donde  $\Psi$  es el valor del flujo en la superficie dada y,  $\Psi_m$  y  $\Psi_s$ , son los valores en el eje magnético y en la separatriz, respectivamente. El eje magnético queda definido como la línea central alrededor de la cual se enroscan el resto de las líneas de campo magnético, mientras que la separatriz representa la frontera entre las superficies de flujo cerradas y las abiertas. Entonces,  $\rho_\Psi$  varía entre 0, en el eje magnético, y 1, en la separatriz.

### 1.3.1.2. Potencia de fusión

Para obtener un balance de energía positivo, no solo se necesita conseguir la temperatura adecuada, sino también valores óptimos de densidad y tiempo de confinamiento. Inicialmente el calentamiento del plasma se realiza por medios externos, aunque

es deseable alcanzar un equilibrio en el que este sea provisto exclusivamente por los productos de la reacción, lo que se denomina ignición.

Considerando la fusión de deuterones y tritones (ecuación 1.3), la potencia termónuclear asociada  $P_f$  se puede calcular como el producto entre la tasa de fusión  $S_V$  (ecuación 1.8) y la energía liberada por fusión ( $Q = 17,6$  MeV). Los neutrones no son susceptibles al campo magnético y escapan del plasma pero, dado un confinamiento idóneo, es posible que las partículas  $\alpha$  depositen su energía ( $E_\alpha = 3,54$  MeV) mediante colisiones.

El balance energético consiste en igualar la potencia entregada al plasma, por medios de calentamiento externos  $P_H$  y por deposición de las partículas  $\alpha$   $P_\alpha$ , con las pérdidas  $P_L$ :

$$P_H + P_\alpha = P_L. \quad (1.13)$$

La potencia termónuclear de la reacción se maximiza cuando las densidades de los reactivos son iguales, es decir,  $n_{2H} = n_{3H} = \frac{n}{2}$ . Teniendo esto en cuenta, y siendo  $V$  el volumen del plasma, la potencia total depositada por las  $\alpha$  vale:

$$P_\alpha = \frac{1}{4} n^2 \langle \sigma v \rangle E_\alpha V. \quad (1.14)$$

Las pérdidas de potencia se pueden cuantificar como el cociente entre la energía total del plasma  $W$  y el tiempo de confinamiento del mismo  $\tau_E$ . La energía promedio de las partículas es  $\frac{3}{2}T$ , y como hay igual cantidad de iones y electrones,  $W = 3\bar{n}TV$ , por lo tanto:

$$P_L = \frac{W}{\tau_E} = \frac{3\bar{n}TV}{\tau_E}. \quad (1.15)$$

En definitiva, asumiendo densidad y temperatura constantes por simplicidad, el balance de potencias se puede expresar como:

$$P_H = \left( \frac{3nT}{\tau_E} - \frac{1}{4} n^2 \langle \sigma v \rangle E_\alpha \right) V. \quad (1.16)$$

De modo que la condición de ignición se cumple si:

$$n\tau_E > \frac{12}{\langle \sigma v \rangle} \frac{T}{E_\alpha}. \quad (1.17)$$

A su vez, en el rango de temperaturas de trabajo, entre 10 keV y 20 keV, la reactividad se puede ajustar con un error menor al 10% como:

$$\langle \sigma v \rangle = 1,1 * 10^{-24} T^2 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}, T [\text{keV}]. \quad (1.18)$$



Entonces, reemplazando en la desigualdad 1.17 se obtiene lo que se designa como triple producto de fusión:

$$nT\tau_E > 3 * 10^{21} \text{ m}^{-3} \text{ keV s.} \quad (1.19)$$

Siendo esta una forma conveniente de expresar la condición de ignición debido a que aparece la relación entre la temperatura, la densidad y el tiempo de confinamiento del plasma.

Por otro lado, una medida de la eficiencia es la relación entre la potencia termonuclear generada y la potencia de calentamiento entregada por medios externos. Luego, se define el factor  $Q_f$  de la siguiente manera:

$$Q_f = \frac{P_f}{P_H}. \quad (1.20)$$

Notar que bajo la condición de ignición,  $Q_f \rightarrow \infty$ . No obstante, es posible obtener una ganancia energética apreciable aún manteniendo cierto grado de calentamiento externo.

Hasta el momento, ningún tokamak ha logrado una ganancia neta de energía, o sea,  $Q_f > 1$ , durante un período de tiempo prolongado. Sin embargo, se espera que esto cambie en el futuro cercano con el progreso del proyecto ITER [10], un esfuerzo internacional con el objetivo de demostrar la viabilidad de la fusión nuclear como fuente energética. El reactor fue diseñado para operar con un factor  $Q_f \geq 10$ , alcanzando una potencia termonuclear de  $P_f = 500 \text{ MW}$ .

## 1.4. Motivación

La fusión nuclear se postula como la base energética del futuro debido a sus características intrínsecas. Se destaca por tener el potencial de producir una abundante cantidad de energía de manera "limpia", es decir, sin la emisión de gases de efecto invernadero, como los combustibles fósiles, ni la generación de desechos radiactivos de larga vida media, como la tecnología de fisión nuclear. Además, es segura y controlable, en donde las perturbaciones ocasionadas tienden a enfriar el plasma y frenar la reacción.

El combustible propuesto suele ser una mezcla de deuterio y tritio. El deuterio se encuentra en la naturaleza y existen técnicas probadas para la separación del mismo, del agua, por ejemplo; mientras que el tritio es un isótopo radiactivo de vida media corta que se prevé generar directamente dentro de los tokamaks a partir de la reacción entre litio, colocado adredeamente en las paredes, y los neutrones provenientes de la fusión. Esta mezcla permite una alta densidad de energía, o sea, se obtiene una gran cantidad de energía en relación al volumen de combustible utilizado.

Por todo esto, es importante continuar con los esfuerzos para dominar la fusión nuclear a pesar de que el camino ha demostrado ser tortuoso. Los códigos de partículas (capítulo 3) simulan el movimiento que llevan a cabo los iones o electrones dentro de un tokamak. Un código de órbita completa (OC) describe la trayectoria exacta mientras que un código de centro de giro (CG) solo calcula el recorrido que realiza el centro de giro.

La ventaja del código CG se fundamenta en el hecho de requerir un menor tiempo de cómputo que el código OC. Sin embargo, su representación de la realidad depende de la importancia del radio de Larmor de la partícula, definido en el apartado 2.1.1, con respecto a otras longitudes características de sistema.

El grupo de Fusión Nuclear y Física de Plasmas del Centro Atómico Bariloche cuenta con un código OC con colisiones desarrollado por Clauser en su tesis de Doctorado en Física [6], denominado FOCUS (Full-Orbit CUda Solver) [11], y un código CG sin colisiones realizado por Aguirre durante su tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas [8]. El objetivo de este trabajo es implementar un operador de colisiones elásticas en el código CG, validarlo y asegurar la compatibilidad entre ambos códigos; con vistas a que sea simple programar una versión CG-OC [12] en el futuro, en donde se pueda aprovechar tanto la velocidad del código CG como la precisión del código OC cuando se requiera.

# Capítulo 2

## Dinámica de partículas cargadas

### 2.1. Dinámica de partículas cargadas en campos electromagnéticos

En presencia de un campo electromagnético, la fuerza de Lorentz actúa sobre las partículas cargadas. Por lo tanto, ignorando otro tipo de interacciones, como la gravitatoria, las ecuaciones de movimiento son:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}, \quad (2.1)$$

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q \left( \vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right). \quad (2.2)$$

En donde  $\vec{r}$  es la posición de la partícula,  $\vec{v}$  es su velocidad,  $m$  es su masa y  $q$  es su carga eléctrica;  $t$  es el tiempo,  $\vec{E}$  es el campo eléctrico,  $\vec{B}$  es el campo magnético y  $c$  es el valor de la velocidad de la luz en el vacío.

A continuación, se presentan casos particulares. En especial, se va a asumir que el campo eléctrico es nulo, ya que en la implementación del código CG (apartado 3.2) no se consideraron posibles perturbaciones que puedan influir sobre el plasma, como tampoco campos generados por la rotación propia del mismo o de manera externa.

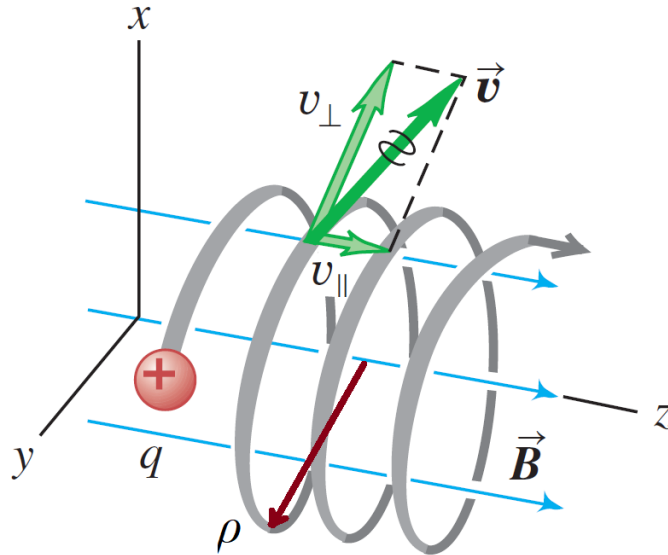
#### 2.1.1. Campo eléctrico nulo y campo magnético uniforme

Si el campo eléctrico es nulo,  $\vec{E} = \vec{0}$ , la ecuación 2.2 se reduce a:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q \left( \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right). \quad (2.3)$$

Y como la fuerza que actúa sobre la partícula es perpendicular a su dirección de movimiento, no realiza trabajo y la energía cinética se conserva, o sea,  $W = \frac{1}{2}mv^2 = cte$ .

Se ilustra la órbita que sigue una partícula cargada positivamente en un campo magnético estático en el tiempo y uniforme en el espacio en la figura 2.1. Dado que no se ejerce fuerza en la dirección de  $\vec{B}$ , la velocidad paralela al campo  $v_{\parallel}$  es constante. Luego, recordando la conservación de la energía cinética, resulta que la velocidad perpendicular al campo  $v_{\perp}$  también es constante.



**Figura 2.1:** Trayectoria de una partícula cargada positivamente en un campo magnético uniforme [5].

El movimiento llevado a cabo por la partícula puede ser descrito a través de la ecuación 2.3. Considerando que la dirección del campo magnético coincide con el eje  $z$ , como se observa en la figura 2.1, se obtiene:

$$x(t) = \frac{v_{\perp}}{\Omega} [1 - \cos(\Omega t)] + x_0, \quad (2.4)$$

$$y(t) = \frac{v_{\perp}}{\Omega} \sin(\Omega t) + y_0, \quad (2.5)$$

$$z(t) = v_{\parallel} t + z_0. \quad (2.6)$$

Estas ecuaciones manifiestan una trayectoria de forma helicoidal alrededor de las líneas de campo magnético con una frecuencia  $\Omega = \frac{q}{mc} B$ , conocida como frecuencia de ciclotrón.  $x_0$ ,  $y_0$  y  $z_0$  son las coordenadas iniciales de la partícula, y  $x(t)$ ,  $y(t)$  y  $z(t)$ , las correspondientes a tiempo  $t$ . Además, se define el radio de Larmor  $\rho = \frac{v_{\perp}}{\Omega}$  como la distancia entre el centro de giro de la partícula y su órbita exacta. Otro parámetro, que será importante en el código CG, es el pitch  $\lambda = \frac{v_{\parallel}}{v}$ .

Si bien el movimiento de la partícula cargada genera un campo magnético que se opone al campo externo, en general esta contribución es insignificante y no se incluye en los cálculos.

### 2.1.2. Campo eléctrico nulo y gradientes de campo magnético

Cuando los campos magnéticos no son uniformes espacialmente ocurren derivas en el movimiento de las partículas. Suponiendo que los gradientes de campo magnético son débiles, es decir, su longitud típica asociada es mucho mayor al radio de Larmor, es posible desarrollar  $\vec{B}$  a primer orden alrededor del centro de giro:

$$\vec{B} \cong \vec{B}_{cg} + (\vec{\rho} \cdot \nabla) \vec{B}_{cg}. \quad (2.7)$$

Siendo  $\vec{B}_{cg}$  el valor del campo magnético en el centro de giro de la partícula y  $\vec{\rho}$  la posición medida a partir de este.

A su vez, se puede separar la velocidad de la partícula en una suma de dos componentes, la correspondiente al caso de campo uniforme  $\vec{v}_0$  más una corrección por la deriva introducida debido al gradiente de campo  $\vec{v}_g$ :

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \vec{v}_g. \quad (2.8)$$

Entonces, reemplazando las ecuaciones 2.7 y 2.8 en la igualdad 2.3, y operando matemáticamente, es posible calcular la velocidad de deriva debida a un gradiente de campo magnético:

$$\vec{v}_g = \frac{v_{\perp}^2}{2\Omega B_{cg}} \left( \hat{b}_{cg} \times \nabla B_{cg} \right). \quad (2.9)$$

Aquí  $\hat{b}_{cg}$  es el versor que apunta en la dirección de  $\vec{B}_{cg}$ . Por otro lado, en caso de que las líneas de campo se curven, las partículas se verán sometidas a una fuerza centrífuga. Nuevamente, esto resulta en un movimiento de deriva, con una velocidad asociada  $\vec{v}_c$ :

$$\vec{v}_c = \frac{v_{\parallel}^2}{\Omega B_{cg}} \left( \frac{1}{R_B} \hat{R}_B \times \vec{B}_{cg} \right). \quad (2.10)$$

Donde  $R_B$  es el radio de curvatura de las líneas de campo magnético y  $\hat{R}_B$  es su versor correspondiente. De forma general, la curvatura  $\vec{\kappa}$  se expresa como:

$$\vec{\kappa} = -\frac{1}{R_B} \hat{R}_B = -\hat{b}_{cg} \cdot \nabla \hat{b}_{cg}. \quad (2.11)$$

En un tokamak (apartado 1.3.1), se tiene tanto un gradiente de campo magnético como una curvatura del mismo. En este caso, es posible unificar  $\vec{v}_g$  y  $\vec{v}_c$  en una única velocidad de deriva  $\vec{v}_d$  dada por:

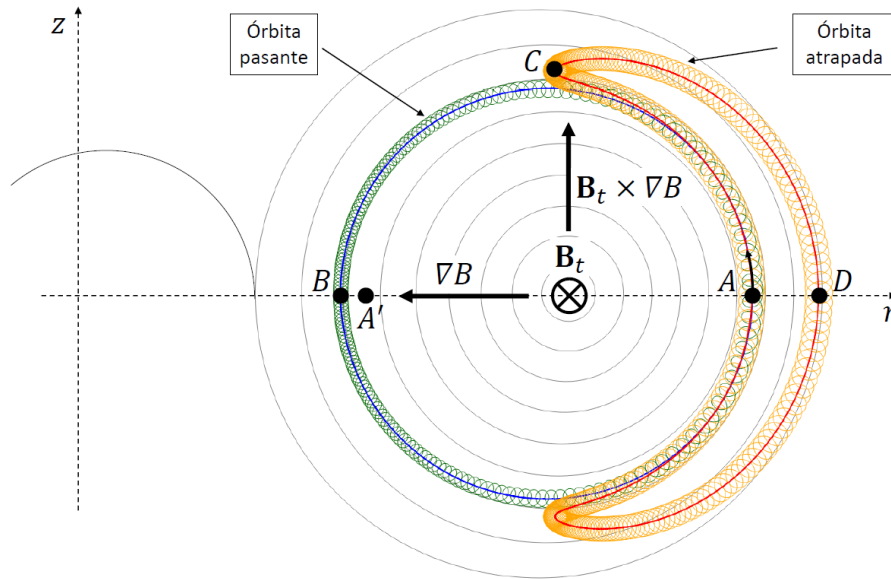
$$\vec{v}_d = \vec{v}_g + \vec{v}_c = \frac{\vec{B}_{cg} \times \nabla B_{cg}}{\Omega B_{cg}^2} \left( v_{\parallel}^2 + \frac{v_{\perp}^2}{2} \right). \quad (2.12)$$

Esta expresión muestra el hecho de que, a pesar de mantener confinado un plasma, los

movimientos de deriva pueden provocar la pérdida de partículas.

### 2.1.3. Tipos de órbitas en tokamaks

Los dos tipos elementales de órbitas de partículas, pasante y atrapada, se presentan para un tokamak de sección poloidal circular en la figura 2.2. Si bien el movimiento es mayormente toroidal, es usual graficar la proyección poloidal debido a la simetría del sistema.



**Figura 2.2:** Proyección poloidal de órbitas pasante y atrapada en un tokamak de sección poloidal circular [6].

Aquí se puede advertir el efecto de la velocidad de deriva (ecuación 2.12) sobre las trayectorias de las partículas. Es necesario destacar el hecho de que el campo magnético es principalmente toroidal, y tiene una dependencia con la inversa del radio, como se indica en la figura 1.4. Ambas partículas graficadas comienzan su recorrido en el punto  $A$  y con el sentido marcado en la figura. Notar que  $\vec{v}_d$  tiene la dirección de  $\vec{B}_t \times \nabla B$ , por lo que apunta hacia el eje  $z$  positivo.

Con respecto a la órbita pasante, se observa que el movimiento comienza migrando hacia radios menores mientras recorre un camino helicoidal alrededor de la línea de campo correspondiente. Sin embargo, la velocidad de deriva produce un desplazamiento hacia superficies de flujo exteriores, llegando hasta  $B$  en lugar de  $A'$  en la primera mitad del recorrido. No obstante, el impacto de  $\vec{v}_d$  se compensa en la segunda parte de la trayectoria, trasladándose a superficies de flujo interiores y retornando nuevamente al punto  $A$ .

Antes de analizar la órbita atrapada, es necesario mencionar la constancia de la energía cinética  $W$  y el momento magnético  $\mu$  de cada partícula. La energía cinética se conserva debido a que las fuerzas que actúan no realizan trabajo:

$$W = \frac{1}{2}mv_{\parallel}^2 + \frac{1}{2}mv_{\perp}^2 = cte. \quad (2.13)$$

Por otro lado, es posible demostrar que si el campo magnético no varía apreciablemente en el espacio (comparado al radio de Larmor) ni en el tiempo (comparado a un período de rotación), el momento magnético se conserva:

$$\mu = \frac{mv_{\perp}^2}{2B} = cte. \quad (2.14)$$

Entonces, cuando una partícula se desplaza hacia radios menores,  $B$  aumenta y  $v_{\perp}$  se debe incrementar para mantener la constancia de  $\mu$ . Al mismo tiempo, dado el incremento en  $v_{\perp}$ ,  $v_{\parallel}$  disminuye por la conservación de la energía.

De esta manera, lo que sucede en una órbita atrapada es que la partícula no dispone inicialmente de suficiente energía tal que llega a un punto de su órbita en donde  $v_{\parallel}$  se vuelve cero y la partícula “rebota”, como se marca con la letra  $C$  de la figura 2.2. Luego, ocurre un desplazamiento hacia superficies de flujo exteriores por el efecto de la velocidad de deriva hasta llegar a  $D$  en la primera mitad del recorrido. Por último, la deriva se compensa una vez más y la partícula retorna a su posición inicial.

## 2.2. Colisiones elásticas

El desarrollo del operador de colisiones elásticas se basa en la teoría de Fokker-Planck. En este aspecto, se siguió el cálculo presentado en [6]. Se recurre a una descripción estadística del problema en donde la función de distribución  $f_{\alpha}(\vec{r}, \vec{v}, t)$  representa la cantidad de partículas de la especie  $\alpha$  que se encuentran en un volumen diferencial  $d^3r d^3v$  centrado en  $(\vec{r}, \vec{v})$  a tiempo  $t$ . La evolución de la función de distribución responde a la ecuación de Boltzmann:

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{r}} + \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right) \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial \vec{v}} = \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \Big|_{col}. \quad (2.15)$$

En esta expresión, el miembro de la izquierda considera el efecto del campo electromagnético sobre el movimiento de las partículas y el de la derecha denota el impacto de las colisiones.

Asumiendo que el plasma es localmente uniforme y homogéneo, el término colisionante resulta:

$$\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \Big|_{col} = \left[ -\frac{\partial}{\partial v_i} F_i(\vec{v}, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} D_{ik}(\vec{v}, t) \right] f_{\alpha}(\vec{v}, t). \quad (2.16)$$

En donde los índices  $i, k$  recorren las tres direcciones del espacio,  $F_i$  es el término de fricción y  $D_{ik}$  es el tensor de difusión:

$$F_i(\vec{v}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta v_i \rangle_{\Delta t}}{\Delta t}, \quad (2.17)$$

$$D_{ik}(\vec{v}, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta v_i \Delta v_k \rangle_{\Delta t}}{\Delta t}. \quad (2.18)$$

Dado que el objetivo es implementar el operador de colisiones en un código de partículas (capítulo 3), la ecuación 2.16 debe transformarse a una descripción de trayectorias individuales. Esto se lleva a cabo a través de una ecuación de Langevin. En particular, considerando que el plasma es isotrópico y siguiendo el cálculo de Íto:

$$\frac{dv_i}{dt} = F_i(v, t) + \sqrt{D_{ii}(v, t)} \xi_i(t). \quad (2.19)$$

Siendo  $\xi_i(t)$  un ruido blanco Gaussiano con media cero y  $v_i$  la componente  $i$  de la velocidad de la partícula. Además, para un plasma formado por especies  $\beta$  en equilibrio y con una distribución energética Maxwelliana:

$$F_{\parallel}(v) = -\nu_{sd}(v)v, \quad (2.20)$$

$$D_{\parallel}(v) = \nu_{\parallel}(v)v^2, \quad (2.21)$$

$$D_{\perp}(v) = \nu_{\perp}(v)v^2. \quad (2.22)$$

Adicionalmente, la frecuencia de frenamiento  $\nu_{sd}(v)$  y las frecuencias de dispersión paralela  $\nu_{\parallel}(v)$  y perpendicular  $\nu_{\perp}(v)$  valen [13]:

$$\nu_{sd}(v) = \sum_{\beta} \frac{A_D^{\beta}}{2v^3} \left( 1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} \right) [\phi(x_{\beta}) - x_{\beta} \phi'(x_{\beta})], \quad (2.23)$$

$$\nu_{\parallel}(v) = \sum_{\beta} \frac{A_D^{\beta}}{v^3} G(x_{\beta}), \quad (2.24)$$

$$\nu_{\perp}(v) = \sum_{\beta} \frac{A_D^{\beta}}{v^3} [\phi(x_{\beta}) - G(x_{\beta})]. \quad (2.25)$$

En estas ecuaciones,  $x_{\beta} = v/v_{s,\beta}$  con  $v_{s,\beta} = \sqrt{2T_{\beta}/m_{\beta}}$ ,  $\phi(x)$  es la función error,

$$G(x) = \frac{\phi(x) - x\phi'(x)}{2x^2}, \text{ y} \quad (2.26)$$

$$A_D^{\beta} = \frac{8\pi q_{\alpha}^2 q_{\beta}^2}{m_{\alpha}^2} n_{\beta} \ln(\Lambda_{\beta}). \quad (2.27)$$

Donde el factor  $\ln(\Lambda_{\beta})$  se denomina logaritmo de Coulomb, y se define en función de los parámetros de impacto mínimo  $b_{min}$  y máximo  $b_{max}$  de las colisiones coulombianas como:



$$\ln(\Lambda_\beta) = \ln\left(\frac{b_{max}}{b_{min}}\right). \quad (2.28)$$

El límite superior de la interacción está relacionado con la distancia de apantallamiento en el plasma. Entonces, se considera la longitud de Debye, presentada en la ecuación 1.10 para una partícula en reposo, pero con una corrección debido al movimiento de la carga:

$$b_{max} = \left[ \sum_{\beta} \frac{\omega_{\beta}^2}{\bar{v}_{\beta}^2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.29)$$

Aquí  $\omega_{\beta}$  es la frecuencia del plasma de la especie  $\beta$ , introducida para los electrones en la ecuación 1.11, y  $\bar{v}_{\beta}^2 = v_{th,\beta}^2 + v^2$  con  $v_{th,\beta} = \sqrt{T_{\beta}/m_{\beta}}$ .

En lo que respecta al límite inferior, hay dos opciones posibles, el límite clásico  $b_{min}^{CL}$  y el límite cuántico  $b_{min}^{QM}$ . La elección de uno u otro queda definido por el mayor entre ambos. Siendo  $m_{\alpha\beta}$  la masa reducida entre las partículas y  $\hbar$  la constante de Planck reducida:

$$b_{min}^{CL} = \frac{q_{\alpha}q_{\beta}}{m_{\alpha\beta}\bar{v}_{\beta}^2}, \quad (2.30)$$

$$b_{min}^{QM} = \frac{\hbar}{2m_{\alpha\beta}\bar{v}_{\beta}}. \quad (2.31)$$

## 2.3. Distribución de frenamiento

Como producto de las fusiones entre deuterones y tritones (ecuación 1.3) se generan partículas  $\alpha$  con una energía inicial de 3,54 MeV. El estudio de su dinámica es fundamental debido a que resulta valioso que depositen la mayor cantidad de energía posible en el plasma para mantener su temperatura y luego lo abandonen, ya que una vez termalizadas actúan como contaminantes.

Empleando la ecuación de Boltzmann (ecuación 2.15) es posible obtener una solución energética estacionaria para la población de partículas  $\alpha$ , la cual se denomina distribución de frenamiento. El miembro de la derecha en dicha ecuación se puede descomponer como una suma entre un término asociado a la energía y otro al pitch, según se muestra en el capítulo 3 (apartado 3.2.1).

En particular, considerando que la energía de las partículas a estudiar es muy superior a la temperatura del plasma y que provienen de una fuente monoenergética e isotrópica, su distribución energética obedece [6]:

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} [v^3 \nu_E f_v] + \frac{S_V}{4\pi v^2} \delta(v - v_0). \quad (2.32)$$

En donde  $f_v$  es la distribución energética de las partículas,  $\nu_E$  es la frecuencia de relajación energética (ecuación 3.38),  $S_V$  es la tasa de fusión por unidad de volumen (ecuación 1.8) y  $\delta(v - v_0)$  es la función delta de Dirac centrada en  $v_0$ , que es la velocidad correspondiente a una energía de 3,54 MeV en este caso.

La población estacionaria se obtiene anulando la derivada temporal de  $f_v$  e integrando en el espacio de velocidades, asumiendo que  $f_v = 0$  cuando  $v > v_0$ . A su vez, dada la isotropía de la fuente, al integrar en ángulo sólido queda:

$$f_v = \begin{cases} \frac{S_V}{\nu_E} \tilde{f}_{sd}, & v \leq v_0. \\ 0, & v > v_0. \end{cases} \quad (2.33)$$

Siendo  $\tilde{f}_{sd}$  la función de frenado:

$$\tilde{f}_{sd} = \frac{v^2}{v_c^3 + v^3}. \quad (2.34)$$

Y  $v_c$  se conoce como la velocidad crítica:

$$v_c^3 = \frac{3\pi^{1/2} m_e}{4 m} \left( \sum_{\beta} \frac{n_{\beta} \ln(\Lambda_{\beta})}{n_e \ln(\Lambda_e)} \frac{m}{m_{\beta}} \right) v_{s,e}^3 \quad (2.35)$$

Donde  $\beta$  se refiere a las distintas especies presentes en el plasma y  $v_{s,e} = \left( \frac{2T_e}{m_e} \right)^{1/2}$ .

Entonces, el perfil energético analítico de las partículas  $\alpha$  tiene la forma de la función de frenado. Esta solución se corresponde a un caso estacionario en donde existe un equilibrio entre las partículas  $\alpha$  creadas por fusión y las que se pierden por distintos procesos, como por ejemplo, condiciones iniciales desfavorables o colisiones con otras partículas.

# Capítulo 3

## Códigos de partículas

Los códigos de partículas destinados al estudio de transporte en reactores de fusión simulan el movimiento que realizan partículas cargadas eléctricamente sometidas a un campo electromagnético determinado. Tienen la capacidad de calcular las trayectorias de una pequeña población de partículas siendo una herramienta valiosa para el análisis de diversas situaciones experimentales. En especial, uno de los aspectos más interesantes es el estudio de las partículas  $\alpha$  que nacen en la reacción de fusión entre deuterio y tritio (ecuación 1.3).

Un código de órbita completa (OC) calcula exactamente el desplazamiento de la partícula (apartado 3.1), mientras que un código de centro de giro (CG) resuelve exclusivamente la evolución temporal de su centro de giro (apartado 3.2). La ventaja de este último reside en que demora un menor tiempo de cómputo a cambio de una pérdida en la precisión con respecto a la posición de la partícula.

También existe la posibilidad de combinar ambos estilos en una versión CG-OC con el objetivo de explotar las virtudes de cada uno. De esta manera, se aprovecha la velocidad del código CG siempre y cuando la importancia relativa del radio de Larmor (apartado 2.1.1) sea despreciable. Si esto no se verifica, como sucede en zonas cercanas a la separatriz (apartado 4.2.1), se debe conmutar al código OC para continuar con la simulación.

### 3.1. Código OC

El código OC calcula la trayectoria exacta que describe una partícula cargada considerando la fuerza de Lorentz que actúa sobre ella debido a la presencia de campos electromagnéticos. Entonces, utiliza las ecuaciones 2.1 y 2.2 presentadas en el capítulo 2. En este caso, para la implementación del método de integración es importante separar las derivadas temporales del resto de los términos. Por completitud, se exponen a continuación las ecuaciones a resolver:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}, \quad (3.1)$$

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{q}{m} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right). \quad (3.2)$$

A modo de simplificación, y para lograr una óptima estabilidad numérica, las expresiones a programar se adimensionalizan en función de las siguientes referencias:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{\tilde{r}} = \frac{\vec{r}}{a}, \quad (3.3)$$

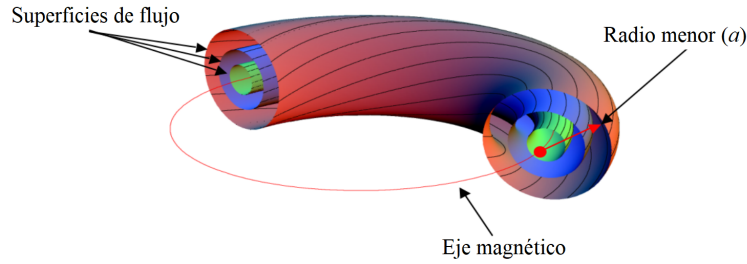
$$\vec{v} \rightarrow \vec{\tilde{v}} = \frac{\vec{v}}{v_0}, \quad (3.4)$$

$$t \rightarrow \tilde{t} = \Omega_0 t, \quad (3.5)$$

$$\vec{B} \rightarrow \vec{\tilde{B}} = \frac{\vec{B}}{B_0}, \quad (3.6)$$

$$\vec{E} \rightarrow \vec{\tilde{E}} = \frac{\vec{E}}{B_0 v_0 / c}. \quad (3.7)$$

Aquí el símbolo  $\sim$  indica que es una variable adimensional. Además,  $a$  es el radio menor del tokamak,  $v_0$  es la velocidad inicial de la partícula,  $\Omega_0$  es la frecuencia de ciclotrón inicial (apartado 2.1.1) y  $B_0$  es el valor del campo magnético en el eje magnético del tokamak. El radio menor del tokamak representa la distancia promedio entre el eje magnético y la separatriz. Se grafican estos parámetros en la figura 3.1.



**Figura 3.1:** Eje magnético, radio menor  $a$  y superficies de flujo para un tokamak de sección poloidal circular [7].

Luego, definiendo el factor  $\gamma$  como  $\gamma = \frac{v_0}{a\Omega_0}$ , las ecuaciones 3.1 y 3.2 adimensionalizadas son:

$$\frac{d\vec{\tilde{r}}}{d\tilde{t}} = \gamma \vec{\tilde{v}}, \quad (3.8)$$

$$\frac{d\vec{\tilde{r}}}{d\tilde{t}} = \vec{\tilde{E}} + \vec{\tilde{r}} \times \vec{\tilde{B}}. \quad (3.9)$$

Por último, se escriben en el sistema de coordenadas cilíndricas  $(r, \phi, z)$  debido a la

simetría del problema:

$$\frac{d\tilde{r}}{d\tilde{t}} = \gamma\tilde{v}_r, \quad (3.10)$$

$$\frac{d\phi}{d\tilde{t}} = \gamma\frac{\tilde{v}_\phi}{\tilde{r}}, \quad (3.11)$$

$$\frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} = \gamma\tilde{v}_z, \quad (3.12)$$

$$\frac{d\tilde{v}_r}{d\tilde{t}} = \gamma\frac{\tilde{v}_\phi^2}{\tilde{r}} + \tilde{E}_r + \tilde{v}_\phi\tilde{B}_z - \tilde{v}_z\tilde{B}_\phi, \quad (3.13)$$

$$\frac{d\tilde{v}_\phi}{d\tilde{t}} = -\gamma\frac{\tilde{v}_r\tilde{v}_\phi}{\tilde{r}} + \tilde{E}_\phi + \tilde{v}_z\tilde{B}_r - \tilde{v}_r\tilde{B}_z, \quad (3.14)$$

$$\frac{d\tilde{v}_z}{d\tilde{t}} = \tilde{E}_z + \tilde{v}_r\tilde{B}_\phi - \tilde{v}_\phi\tilde{B}_r. \quad (3.15)$$

Para llevar a cabo el cálculo de la órbita, el código requiere como entrada conocimiento del campo electromagnético, del tiempo a simular y de las condiciones iniciales de la partícula. De modo que se deben especificar la posición, la velocidad y la energía de partida, además del tipo de partícula, que queda caracterizado por la masa y la carga.

La integración de las ecuaciones de movimiento (de 3.10 a 3.15) se efectúa mediante un método de Runge-Kutta explícito de cuarto orden que minimiza la pérdida energética [14]. El recorrido que concreta la partícula se simula durante el tiempo pedido bajo la condición de que la misma no atraviese la separatriz.

Como salida del código se obtienen la posición, la velocidad y la energía al finalizar la ejecución del mismo, lo que ocurre al alcanzar el tiempo ingresado o ante la pérdida de la partícula.

En adición, se incorpora un operador de colisiones elásticas, el cual se describe en el apartado 3.1.1.

### 3.1.1. Operador de colisiones elásticas OC

La implementación del operador de colisiones elásticas sigue el desarrollo teórico presentado en el apartado 2.2. Considerando un sistema de referencia local ortogonal ( $\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3$ ) de manera que la dirección de  $\hat{e}_1$  coincida con la velocidad de la partícula previa a la colisión:

$$\frac{dv_1}{dt} = -\nu_{sd}v + \sqrt{\nu_{\parallel}}v^2\xi_1, \quad (3.16)$$

$$\frac{dv_{2,3}}{dt} = \sqrt{\frac{\nu_{\perp}}{2}}v^2\xi_{2,3}. \quad (3.17)$$

Siendo  $v_1$ ,  $v_2$  y  $v_3$  las componentes de la velocidad según  $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$  mientras que  $\nu_{sd}$ ,  $\nu_{\parallel}$ ,  $\nu_{\perp}$  y  $\xi_{1,2,3}$  se corresponden con las definiciones presentadas en el apartado 2.2.

Como consecuencia de la aleatoridad existente en el operador, no es necesario emplear métodos de integración de orden superior para lograr la convergencia [15]. Entonces, utilizando el algoritmo de Euler de primer orden:

$$\Delta v_1 = -\nu_{sd}\Delta t_{ec}v_0 + \sqrt{\nu_{\parallel}\Delta t_{ec}}v_0N_1, \quad (3.18)$$

$$\Delta v_{2,3} = \sqrt{\frac{\nu_{\perp}\Delta t_{ec}}{2}}v_0N_{2,3}. \quad (3.19)$$

En donde  $v_0$  es el módulo de la velocidad antes de la colisión,  $\Delta t_{ec}$  es el paso temporal de integración y  $N_i$  con  $i = 1, 2, 3$  son números aleatorios Gaussianos de media cero y varianza uno ( $\langle N_i \rangle = 0$ ,  $\langle N_i^2 \rangle = 1$ ). Por lo tanto, luego de una colisión la velocidad de la partícula se actualiza como:

$$\vec{v} = \vec{v}_0 + \Delta v_1\hat{e}_1 + \Delta v_2\hat{e}_2 + \Delta v_3\hat{e}_3. \quad (3.20)$$

Es posible asegurar la precisión de este método siempre que el paso temporal se elija de manera tal que  $\nu\Delta t_{ec} \ll 1$ , para todas las frecuencias  $\nu$  involucradas. Además, hay que considerar que en presencia de colisiones se debe proveer al código de información sobre el plasma de fondo. En particular, los tipos de partículas con los que ocurren las colisiones y sus perfiles de densidad y temperatura.

## 3.2. Código CG

El código CG simula la trayectoria del centro de giro de una partícula. Su concepto es similar al del código OC pero difieren en las ecuaciones de movimiento que resuelven. En lugar de almacenar las tres componentes de la posición y de la velocidad  $(\vec{r}, \vec{v})$ , trabaja con la posición del centro de giro, la velocidad paralela al campo magnético y la energía de la partícula  $(r_{cg}^{\vec{r}}, v_{\parallel}, W)$ .

Cuenta con la ventaja de requerir un menor tiempo de cómputo aunque su utilidad está supeditada a que el radio de Larmor sea despreciable con respecto a otras longitudes características del problema.

Se puede seguir la deducción de las ecuaciones a utilizar en el libro de Helander y Sigmar [16]. En este caso, se realiza un tratamiento Lagrangiano del problema. Para una partícula de masa  $m$  y carga  $q$  en un campo electromagnético:

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2} + q\vec{A}(\vec{r}, t)\dot{\vec{r}} - q\Phi(\vec{r}, t), \quad (3.21)$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}, \quad (3.22)$$

$$\vec{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}. \quad (3.23)$$

Aplicando la ecuación de Euler-Lagrange sobre la expresión 3.21 se obtiene la igualdad 3.2, como era de esperarse, que se emplea en el código OC. Entonces, se practica el promedio en una giro-órbita, o sea, a lo largo de una rotación en torno a las líneas de campo magnético. De esta manera, asumiendo pequeñas variaciones espacio-temporales de  $\vec{B}$  en función del radio de Larmor y la frecuencia de ciclotrón, el Lagrangiano promedio es:

$$\bar{L}(r_{cg}^{\vec{r}}, \rho, \vartheta, \dot{r}_{cg}^{\vec{r}}, \dot{\rho}, \dot{\vartheta}, t) = \frac{m(\hat{b}r_{cg}^{\vec{r}})^2}{2} + \frac{m\rho^2\dot{\vartheta}^2}{2} + q\vec{A}r_{cg}^{\vec{r}} + \frac{q\rho^2\dot{\vartheta}}{2} - q\Phi. \quad (3.24)$$

Siendo  $r_{cg}^{\vec{r}}$  la posición del centro de giro,  $\rho$  el radio de Larmor,  $\vartheta$  el ángulo de giro (entre 0 y  $2\pi$ ) y  $\hat{b}$  el versor que apunta en dirección de  $\vec{B}$ .

Ahora, utilizando Euler-Lagrange sobre  $\rho$ ,  $\vartheta$  y  $r_{cg}^{\vec{r}}$ , respectivamente:

$$\dot{\vartheta} = -\Omega, \quad (3.25)$$

$$\mu = \frac{mv_{\perp}^2}{2B} = cte, \quad (3.26)$$

$$m\dot{v}_{\parallel}\hat{b} = q\left(\vec{E}^* + \dot{r}^{\vec{r}} \times \vec{B}^*\right) - \mu\nabla B. \quad (3.27)$$

En donde se introdujeron las siguientes definiciones:

$$\vec{B}^* = \nabla \times \vec{A}^* = \vec{B} + \frac{mv_{\parallel}}{q}\nabla \times \hat{b}, \quad (3.28)$$

$$\vec{E}^* = -q\nabla\Phi - \frac{\partial\vec{A}^*}{\partial t} = \vec{E} - \frac{mv_{\parallel}}{q}\frac{\partial\hat{b}}{\partial t}. \quad (3.29)$$

Además de verificar que la frecuencia de giro de la partícula es  $\Omega$  y que el momento magnético  $\mu$  es constante, la ecuación 3.27 es útil para calcular la evolución temporal de la velocidad paralela. A su vez, ejecutando el producto vectorial entre dicha ecuación y  $\hat{b}$ , se consigue la fórmula para el avance de la posición:

$$r_{cg}^{\vec{r}} = \frac{1}{B_{\parallel}^*} \left( v_{\parallel}\vec{B}^* + \vec{E}^* \times \hat{b} + \frac{\mu}{q}\hat{b} \times \nabla B \right). \quad (3.30)$$

Con  $B_{\parallel}^* = \hat{b} \cdot \vec{B}^*$ . Nuevamente, se adimensionalizan las expresiones 3.27 y 3.30 con los mismos parámetros que en el código OC (ecuaciones 3.3 a 3.7), y se escriben en coordenadas cilíndricas. Sea  $r_{cg}^{\vec{r}} = (\tilde{r}, \phi, \tilde{z})$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{r}}{d\tilde{t}} = \frac{\gamma}{\tilde{B}_{\parallel}^*} & \left[ \tilde{v}_{\parallel} \left( \tilde{B}_r + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial b_z}{\partial \phi} - \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{z}} \right) \right) + \left( \tilde{E}_{\phi} - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{t}} \right) b_z - \right. \\ & \left. - \left( \tilde{E}_z - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_z}{\partial \tilde{t}} \right) b_{\phi} + \tilde{\mu} \left( b_{\phi} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{z}} - b_z \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \phi} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{d\tilde{t}} = \frac{\gamma}{\tilde{r}\tilde{B}_{\parallel}^*} & \left[ \tilde{v}_{\parallel} \left( \tilde{B}_{\phi} + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{\partial b_r}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial b_z}{\partial \tilde{r}} \right) \right) - \left( \tilde{E}_r - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_r}{\partial \tilde{t}} \right) b_z + \right. \\ & \left. + \left( \tilde{E}_z - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_z}{\partial \tilde{t}} \right) b_r + \tilde{\mu} \left( -b_r \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{z}} + b_z \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{r}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{z}}{d\tilde{t}} = \frac{\gamma}{\tilde{B}_{\parallel}^*} & \left[ \tilde{v}_{\parallel} \left( \tilde{B}_z + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{1}{\tilde{r}} b_{\phi} + \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{r}} - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial b_r}{\partial \phi} \right) \right) + \left( \tilde{E}_r - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_r}{\partial \tilde{t}} \right) b_{\phi} - \right. \\ & \left. - \left( \tilde{E}_{\phi} - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{t}} \right) b_r + \tilde{\mu} \left( b_r \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \phi} - b_{\phi} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{r}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{v}_{\parallel}}{d\tilde{t}} = \frac{1}{\tilde{B}_{\parallel}^*} & \left[ \left( \tilde{B}_r + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial b_z}{\partial \phi} - \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{z}} \right) \right) \left( \tilde{E}_r - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_r}{\partial \tilde{t}} - \tilde{\mu} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{r}} \right) + \right. \\ & + \left( \tilde{B}_{\phi} + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{\partial b_r}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial b_z}{\partial \tilde{r}} \right) \right) \left( \tilde{E}_{\phi} - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{t}} - \tilde{\mu} \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \phi} \right) + \\ & \left. + \left( \tilde{B}_z + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{1}{\tilde{r}} b_{\phi} + \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{r}} - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial b_r}{\partial \phi} \right) \right) \left( \tilde{E}_z - \tilde{v}_{\parallel} \frac{\partial b_z}{\partial \tilde{t}} - \tilde{\mu} \frac{\partial \tilde{B}}{\partial \tilde{z}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{\parallel}^* = & \left( \tilde{B}_r + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial b_z}{\partial \phi} - \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{z}} \right) \right) b_r + \left( \tilde{B}_{\phi} + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{\partial b_r}{\partial \tilde{z}} - \frac{\partial b_z}{\partial \tilde{r}} \right) \right) b_{\phi} + \\ & + \left( \tilde{B}_z + \gamma \tilde{v}_{\parallel} \left( \frac{1}{\tilde{r}} b_{\phi} + \frac{\partial b_{\phi}}{\partial \tilde{r}} - \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial b_r}{\partial \phi} \right) \right) b_z. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Entonces, se cuenta con cuatro ecuaciones (de 3.31 a 3.34) que permiten el cálculo del movimiento de la partícula cuando su energía se mantiene constante, lo que ocurre en ausencia de campos eléctricos y entre pasos sin colisiones. Si existe un campo eléctrico, es necesario agregar otra ecuación que denote la dependencia entre  $\vec{E}$  y la energía de la partícula, la cual se puede encontrar en el paper ISDEP [17], por ejemplo, pero que no se consideró en este trabajo.

Al igual que en el código OC, se añade un módulo que representa el efecto de las colisiones elásticas entre la partícula simulada y el plasma de fondo (apartado 3.2.1).



### 3.2.1. Operador de colisiones elásticas CG

El operador de colisiones elásticas en el código CG actúa sobre la velocidad paralela y sobre la energía de la partícula, mientras que, en el código OC, lo hace sobre las tres componentes de la velocidad (apartado 3.1.1).

La derivación de las fórmulas correspondientes se realiza en los papers de Boozer y Kuo-Petravic [18], para colisiones entre partículas de la misma especie, y Chen [9], que extiende el problema a un plano general. A partir de la teoría de Fokker-Planck, se obtiene el siguiente operador de colisiones elásticas generalizado:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right|_{col} &= \frac{\nu_d}{2} \frac{\partial}{\partial \lambda} (1 - \lambda^2) \frac{\partial f_\alpha}{\partial \lambda} + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} [v^2 (\nu_E v f_\alpha)] + \\ &+ \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \left[ v^2 \left( \nu_{Ee} \frac{T_e}{m} + \nu_{Ei} \frac{T_i}{m} \right) \frac{\partial f_\alpha}{\partial v} \right]. \end{aligned} \quad (3.36)$$

En esta expresión,  $f_\alpha$  es la función de distribución de la especie  $\alpha$ ,  $\lambda$  es el pitch,  $v$  es la velocidad y  $m$  es la masa;  $T_i$  y  $T_e$  son las temperaturas de los iones y de los electrones, respectivamente;  $\nu_d$  es la frecuencia de deflexión y  $\nu_E$  es la frecuencia de relajación energética. Conservando la notación utilizada en el apartado 2.2:

$$\nu_d = \frac{\nu_\perp}{2} = \frac{1}{2v^3} \left[ A_D^e (\phi(x_e) - G(x_e)) + \sum_j A_D^j (\phi(x_j) - G(x_j)) \right], \quad (3.37)$$

$$\nu_E = \nu_{Ee} + \nu_{Ei}, \quad (3.38)$$

$$\nu_{Ee} = \frac{A_D^e m_\alpha G(x_e)}{v_{s,e}^3 m_e x_e}, \quad (3.39)$$

$$\nu_{Ei} = \sum_j \frac{A_D^j m_\alpha G(x_j)}{v_{s,j}^3 m_j x_j}. \quad (3.40)$$

Donde  $j$  se refiere a la especie  $j$ -ésima de iones que componen el plasma. Se considera que  $T_j = T_i$ , siendo  $i$  la especie mayoritaria.

El primer término del miembro de la derecha en la ecuación 3.36 involucra al pitch y los dos restantes a la energía. Para la implementación en el código de partículas se debe hallar el operador Monte Carlo equivalente. En particular, en [18] y [9] se deriva un operador basado en la distribución binomial.

En primera instancia se trabaja sobre una de las cantidades y luego con la otra. Comenzando con el pitch, su valor medio es:

$$\langle \lambda \rangle = \int_{-1}^1 \lambda f_\alpha d\lambda. \quad (3.41)$$

Y se puede mostrar integrando por partes que:

$$\frac{d\langle\lambda\rangle}{dt} = -\nu_d\langle\lambda\rangle, \quad (3.42)$$

$$\frac{d\langle\lambda^2\rangle}{dt} = \nu_d(1 - 3\langle\lambda^2\rangle). \quad (3.43)$$

A su vez, el cuadrado de la desviación estándar  $\sigma$  de  $f_\alpha$  en relación a  $\lambda$  es:

$$\sigma^2 = \langle\lambda^2\rangle - \langle\lambda\rangle^2, \quad (3.44)$$

$$\frac{d\sigma^2}{dt} = \nu_d(1 - 3\langle\lambda^2\rangle + 2\langle\lambda\rangle^2). \quad (3.45)$$

Ahora, suponiendo que a tiempo  $t = 0$ , la distribución  $f_\alpha$  es una función delta de Dirac centrada en  $\lambda = \lambda_0$ :

$$\frac{d\langle\lambda\rangle}{dt} = -\nu_d\lambda_0, \quad (3.46)$$

$$\frac{d\sigma^2}{dt} = \nu_d(1 - \lambda_0^2). \quad (3.47)$$

Se espera que, al transcurrir un pequeño instante de tiempo  $\tau$ ,  $f_\alpha$  adquiera la forma de una distribución Gaussiana centrada en  $\lambda = \lambda_0(1 - \nu_d\tau)$  y con una desviación estándar de  $[(1 - \lambda_0)^2 \nu_d\tau]^{1/2}$ .

Entonces, en base a la distribución binomial, el efecto que provocan las colisiones sobre una partícula queda representado por:

$$\lambda_n = \lambda_0(1 - \nu_d\tau) \pm [(1 - \lambda_0)^2 \nu_d\tau]^{1/2}. \quad (3.48)$$

Siendo  $\lambda_0$  el pitch antes de la colisión, y  $\lambda_n$  el valor posterior. El símbolo  $\pm$  significa que el signo debe ser elegido de manera aleatoria pero con igual probabilidad de más y menos. Este operador responde adecuadamente cuando  $\nu_d\tau \ll 1$  y cumple que  $|\lambda_n| < 1$  si  $|\lambda_0| < 1$ .

Análogamente, se deriva el operador energético, el cual modifica la energía de  $W_0$  a  $W_n$  según:

$$\begin{aligned} W_n = & W_0 - 2\nu_{Ee}\tau \left[ W_0 - \frac{1}{2}x_e \frac{\phi'(x_e)}{G(x_e)} T_e \right] - 2\nu_{Ei}\tau \left[ W_0 - \sum_j \frac{1}{2}x_j \frac{\phi'(x_j)}{G(x_j)} T_i \right] \pm \\ & \pm 2[W_0(\nu_{Ee}T_e + \nu_{Ei}T_i)\tau]^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Luego de la actualización de la energía de la partícula  $W$ , se calcula la velocidad paralela  $v_{\parallel}$  con el nuevo valor del pitch  $\lambda$ .

Por último, es necesario que el módulo de colisiones elásticas del código CG actúe

sobre el momento magnético de la partícula. De esta forma,  $\mu$  se considera constante entre colisiones y se modifica con un paso temporal  $\tau$  como:

$$\tilde{\mu} = \gamma \frac{\tilde{v}^2 - \tilde{v}_{\parallel}^2}{2\tilde{B}}. \quad (3.50)$$

A continuación, se procede con la simulación de la trayectoria utilizando las ecuaciones de movimiento presentadas (de 3.31 a 3.34) hasta que ocurra la siguiente colisión.

### 3.3. Generador de partículas originadas por fusión

La distribución espacial de las partículas que son producto de reacciones de fusión está determinada por la tasa de fusión  $S$ . En especial, para la fusión de deuterones y tritones (ecuación 1.3):

$$S = n_{2H}n_{3H}\langle\sigma v\rangle_{2H^3H}V. \quad (3.51)$$

A diferencia de la ecuación 1.8, en donde  $S_V$  es la tasa de fusiones por unidad de volumen,  $S$  ya considera el volumen  $V$  en el que ocurren las reacciones.

La reactividad se encuentra ligada a la temperatura, la cual es función de la posición en el espacio, al igual que las densidades de las distintas especies. Al utilizar un tokamak para confinar las partículas es posible considerar simetría axial, por ende, los perfiles de temperatura y densidad se escriben en función de la coordenada de flujo poloidal  $\rho_{\Psi}$  (ecuación 1.12), como también se hace con la tasa de fusión.

Con respecto a la implementación en un código de partículas, se requiere que las  $\alpha$  que nacen de fusión se distribuyan según  $S$ . Para esto, en primera instancia se calcula la función de distribución acumulada normalizada de la tasa de fusión. Luego, se genera un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1, a partir del cual se obtiene un valor de  $\rho_{\Psi}$  utilizando la función de distribución acumulada. Por último, se asignan las coordenadas  $(r, z)$  mediante curvas de iso- $\rho_{\Psi}$  de forma aleatoria y se distribuye homogéneamente en la coordenada angular  $\phi$ . Este proceso se repite para cada partícula  $\alpha$  a generar, las cuales en su conjunto reconstruyen la tasa de fusión.

#### 3.3.1. Implementación de la distribución de frenamiento

Se presentó una solución estacionaria para la energía de las partículas  $\alpha$  en el capítulo 2 (apartado 2.3). Una forma de evaluar tanto el cálculo analítico como el comportamiento del código, implica simular la evolución de una población de partículas  $\alpha$  en el tiempo y observar si se converge a la ecuación 2.33, recordando que una de las aproximaciones realizadas consideró que las partículas a estudiar son más energéticas que el fondo, por lo que se deberá definir un “corte” en algún valor adecuado de energía.

Si las partículas  $\alpha$  se inicializan con una energía de 3,54 MeV, el tiempo de simulación que conlleva alcanzar el equilibrio puede resultar excesivo. Entonces, una alternativa es incorporar la función de frenamiento analítica a tiempo cero y examinar cómo se modifica con el transcurso del tiempo.

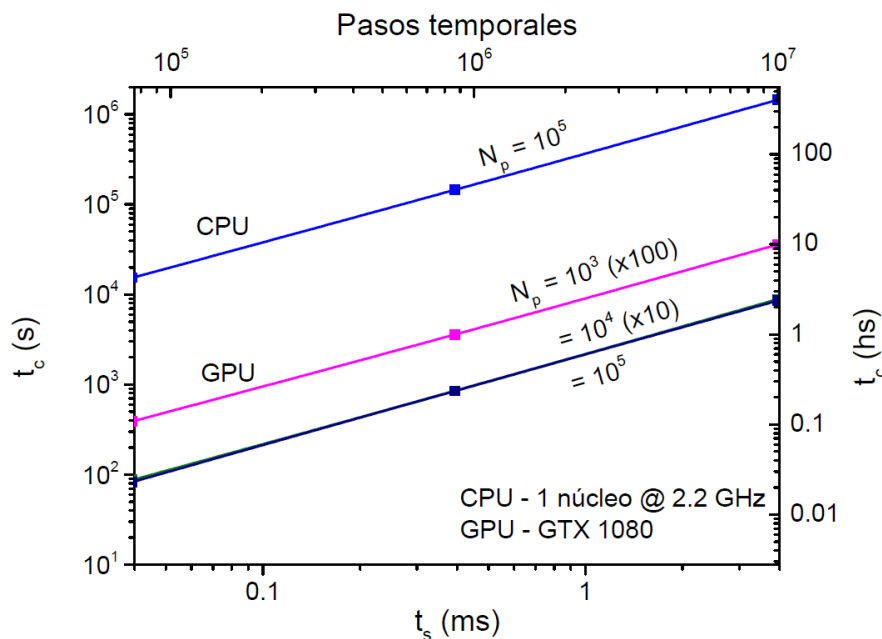
En este último caso, nuevamente se utiliza la ley de transformación de probabilidades, de forma que la velocidad asignada a cada partícula se determina como:

$$v = v_c \left[ \left( 1 + \frac{v_0^3}{v_c^3} \right)^\chi - 1 \right]^{1/3}. \quad (3.52)$$

En donde  $\chi$  es un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1,  $v_0$  es la velocidad correspondiente a la energía de nacimiento (3,54 MeV) y  $v_c$  es la velocidad crítica (ecuación 2.35). De esta manera, se verifica la condición de que el conjunto de partículas represente la distribución de frenamiento.

### 3.4. Paralelización de los códigos

En vista de que la colisión es un proceso estocástico, se requiere simular una gran cantidad de partículas para obtener resultados representativos del comportamiento real. Entonces, considerando que las partículas no interactúan entre sí y tampoco modifican el campo electromagnético aplicado, el problema es naturalmente paralelizable. Esta hipótesis se verifica siempre y cuando la proporción de partículas a calcular sea pequeña con respecto a la población total del plasma de fondo.



**Figura 3.2:** Comparación entre los tiempos de cómputo  $t_c$  obtenidos con el código FOCUS (OC) en sus versiones de CPU y de GPU en función del tiempo de simulación  $t_s$  [6].

En el terreno de la paralelización, el rendimiento que ofrece una GPU (unidad de procesamiento gráfico) es equivalente al de cientos de procesadores de CPU (unidad central de procesamiento). Esto se observa en la figura 3.2, que muestra los resultados del estudio que realizó Clauser [6] sobre versiones en CPU (1 núcleo de 2,2 GHz) y en GPU (GTX 1080) del código FOCUS de órbita completa. En particular, se simuló un caso sin colisiones y de un equilibrio analítico con sección circular.

El tiempo de cómputo que demora la versión en CPU presenta un escaleo lineal con el producto entre el número de partículas y la cantidad de pasos temporales. Para la versión en GPU, el escaleo es no lineal si el número de partículas es pequeño, pero se vuelve lineal en el orden de las miles.

En conclusión, para el caso estudiado, se necesitarían alrededor de doscientos procesadores de CPU para igualar el tiempo de cómputo de una GPU. Por lo tanto, para aumentar su eficiencia, los códigos utilizados en este trabajo se programan en GPU, en donde cada partícula simulada es identificada con un “hilo” de la GPU y se considera independiente del resto.



# Capítulo 4

## Simulaciones computacionales

### 4.1. Condiciones de las simulaciones

Para las simulaciones realizadas a lo largo del capítulo 4, exceptuando el apartado 4.5, se utilizó el tokamak ASDEX-U [19], un reactor destinado a simular las condiciones físicas a las que se someterán las futuras plantas de generación eléctrica. El campo magnético implementado se obtuvo de un ajuste numérico a un equilibrio medido experimentalmente en dicho tokamak [20] mientras que el campo eléctrico se consideró nulo.

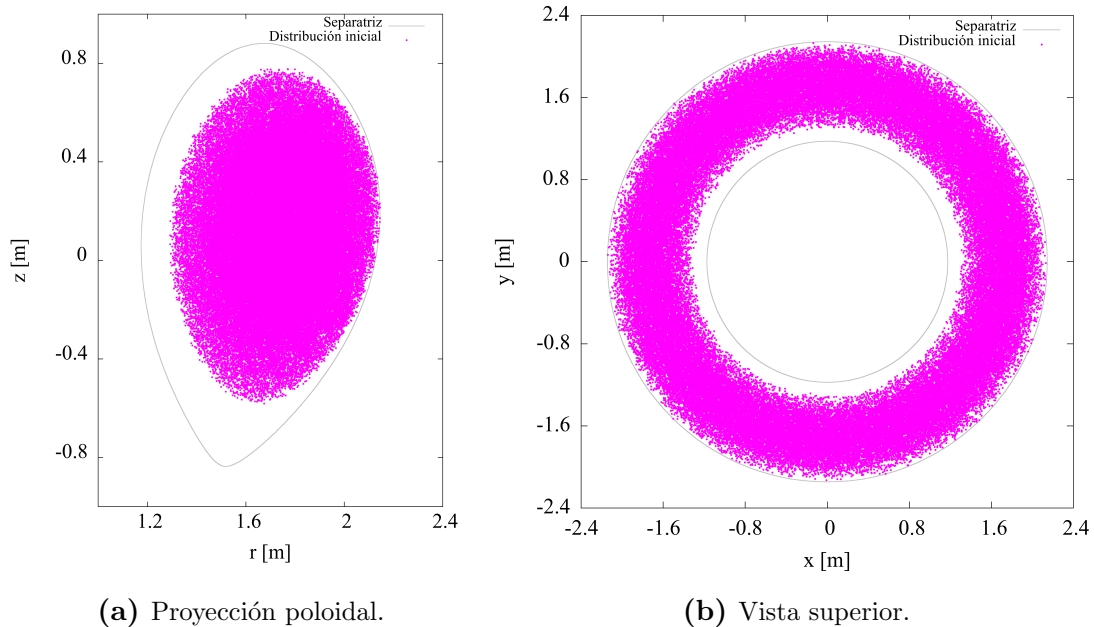
Como condición inicial, se incorporó un archivo que contiene 100.000 partículas distribuidas espacialmente según se muestra en la figura 4.1, y, en pitch de acuerdo a la figura 4.2. Se tiene la libertad de elegir sus energías iniciales y sus masas y cargas, es decir, qué tipos de partículas son. Se decidió trabajar con deuterones de 93 keV de energía inicial, situación representativa de ASDEX-U.

Además, se incluyó un plasma de fondo, sobre el que inciden los deuterones, compuesto por protones y electrones con una temperatura de 2,5 keV y una densidad de  $0,4 * 10^{20} \text{ m}^{-3}$ , constantes en todo el tokamak. No habría inconveniente en considerar perfiles de temperatura y densidad variables, en función de la coordenada de flujo, por ejemplo, pero esto requiere del conocimiento de dichas dependencias funcionales. También se podrían agregar otras especies de iones al plasma de así deseárselo.

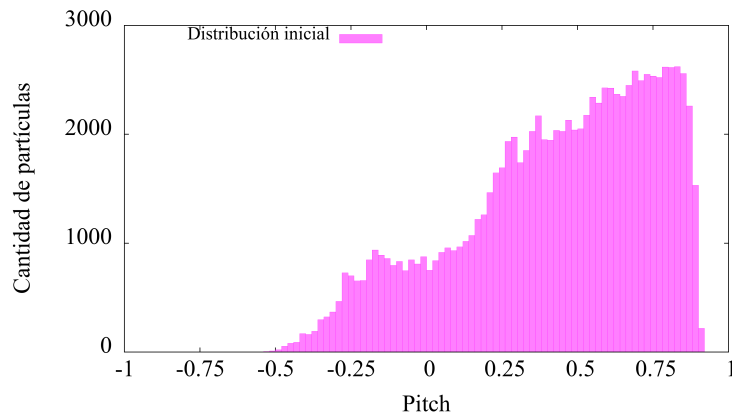
En el código OC se empleó un paso temporal adimensional de 0,16 (en este caso,  $\Omega_0 = 9,58 * 10^7 \text{ s}^{-1}$ ). Entonces, considerando que una giro-órbita (una rotación alrededor de las líneas de campo magnético) equivale a un tiempo adimensional de  $2\pi$ , se utilizaron 40 puntos para definir correctamente la trayectoria helicoidal de una partícula. Mientras que, en el código CG, se impuso un paso temporal adimensional de 10, exprimiendo su ventaja computacional. Por otro lado, el tiempo adimensional con el que se lleva a cabo la integración del operador de colisiones elásticas se definió en 160 para ambos códigos, respetando el requerimiento de ser muy inferior a la menor

frecuencia de colisión.

Cabe mencionar que todas las simulaciones se llevaron a cabo en el *cluster* de procesadores gráficos perteneciente a la sección de Fusión Nuclear y Física de Plasmas del Centro Atómico Bariloche, en donde cada GPU es de tipo GTX 1080.



**Figura 4.1:** Distribución espacial inicial de las partículas simuladas.



**Figura 4.2:** Distribución en pitch inicial de las partículas simuladas.

## 4.2. Trayectorias en ausencia de colisiones

Se simuló el movimiento de los deuterones obviando el efecto de las colisiones. En este caso, no es necesario ingresar información sobre el plasma de fondo ya que la trayectoria de las partículas incidentes se rige exclusivamente por el campo magnético al que se someten.



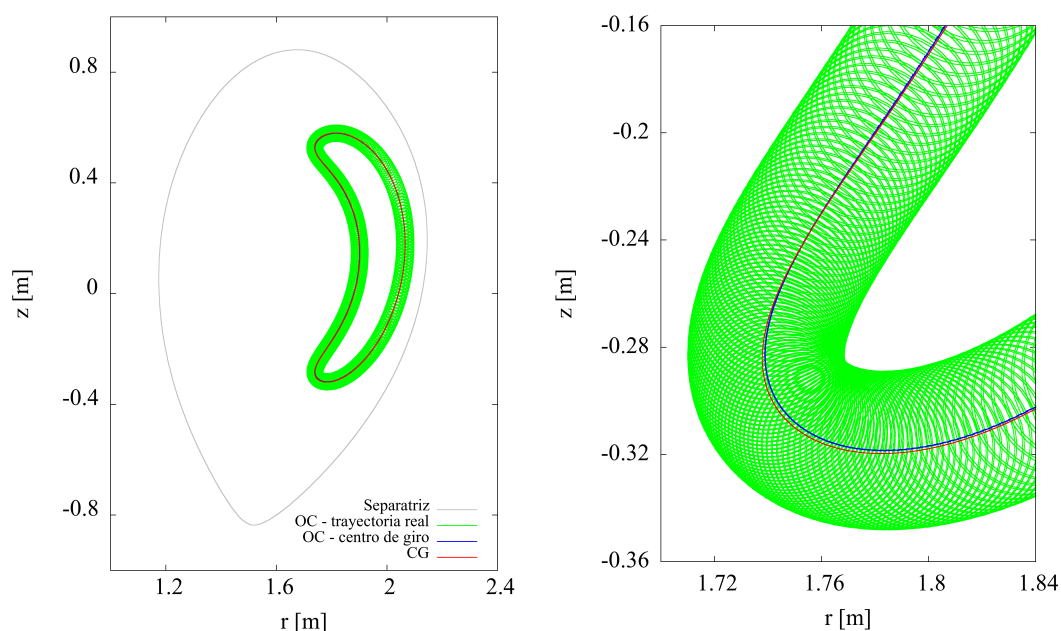
En la tabla 4.1, se presentan los resultados obtenidos con ambos códigos para un tiempo de simulación de 1 ms. En lo que respecta al tiempo de cómputo, se registró una ventaja superior a un orden de magnitud a favor del código CG.

Es notable la diferencia existente en la cantidad de partículas perdidas. A continuación, se destina el apartado 4.2.1 a mencionar el problema de la separatriz. Por otro lado, se evidenció una mayor disipación energética en el código OC, a pesar de emplear el mismo método de integración, replicando los resultados expuestos por Aguirre [8].

Sin colisiones	OC	CG
Tiempo de simulación	1 ms	1 ms
Tiempo de cómputo	26 min 53 s	2 min 11 s
Partículas perdidas	9.511	2.266
Energía cinética promedio de las partículas no perdidas [keV]	92,91	92,99

**Tabla 4.1:** Simulación de 1 ms con ambos códigos en ausencia de colisiones.

La órbita de una partícula atrapada (definida en el apartado 2.1.3) es graficada en la figura 4.3. Con el código OC, se simula el movimiento real helicoidal de la partícula, y, a partir de esto, el propio código tiene la capacidad de calcular la trayectoria de su centro de giro. A su vez, se incluye en la imagen la simulación realizada con el código CG.



(a) Proyección poloidal.

(b) Zoom alrededor del punto de rebote inferior de 4.3a.

**Figura 4.3:** Trayectoria de una partícula atrapada calculada con ambos códigos en ausencia de colisiones.

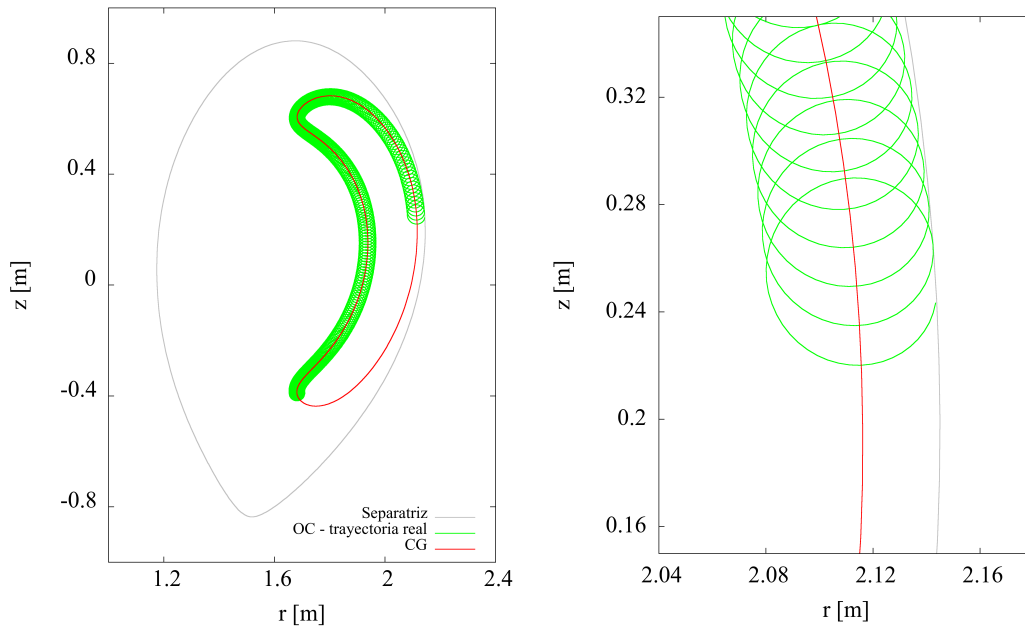
En 4.3b, se presenta un zoom de la partícula atrapada mostrada en 4.3a alrededor

del punto de rebote inferior de su trayectoria. Resulta interesante examinar las órbitas del centro de giro, la calculada con el código OC, y la obtenida directamente con el código CG. Si bien esta última no copia perfectamente a su análoga de órbita completa, se observa que es representativa de la realidad.

#### 4.2.1. Problema de la separatriz

Como se observó en la tabla 4.1, se pierde una mayor cantidad de partículas en el código OC. Particularmente, se consideró perdido a un ion cuando este atraviesa la separatriz, que representa la frontera entre las superficies de flujo cerradas y las abiertas. En consecuencia, el resultado obtenido es esperable. Cuando en el código OC la partícula entra en contacto con la separatriz, todavía se encuentra a un radio de Larmor (apartado 2.1.1) de distancia en el código CG.

En la figura 4.4, se muestra la trayectoria de una partícula que se considera perdida en el código OC pero que continúa su simulación en el código CG. Advertir que, en ausencia de colisiones, las pérdidas ocurren solamente durante la primera órbita. Además, la cota superior para el radio de Larmor de las partículas se corresponde con el caso de pitch cero y tiene un valor de 5 cm. Por lo tanto, los iones cuyo centro de giro se mantenga a una distancia superior a 5 cm de la separatriz, no se perderán.



(a) Proyección poloidal.

(b) Zoom alrededor de la posición de pérdida de 4.4a.

**Figura 4.4:** Trayectoria de una partícula perdida únicamente en el código OC, calculada con ambos códigos en ausencia de colisiones.

### 4.3. Validación del operador de colisiones elásticas

La implementación del operador de colisiones elásticas se realizó en dos fases. En primera instancia, se incorporó la parte determinística y se validó comparando lo obtenido a través de los códigos con una integración numérica de las ecuaciones. Si bien FOCUS es un código ya probado, se repitió este procedimiento en ambos códigos para verificar su correcto funcionamiento.

Luego, se agregó la parte estocástica del operador y se comprobó el resultado del código CG con respecto al del código OC. Esto se efectúa en el apartado de trayectorias con colisiones (4.4). Cabe destacar que el operador depende de las propiedades de las partículas incidentes y del plasma de fondo, pero no del campo magnético.

#### 4.3.1. Código OC

Se utilizó exclusivamente la parte determinística del operador de colisiones OC, la cual se corresponde con el primer término del miembro de la derecha de la ecuación 3.18. De esta manera, el operador queda:

$$\Delta v_1 = -\nu_{sd}\Delta t_{ec}v_0. \quad (4.1)$$

$$\Delta v_{2,3} = 0. \quad (4.2)$$

Se definió una energía final de 3,75 keV, conocida como energía de termalización de los deuterones por ser 1,5 veces la temperatura del plasma de fondo. Se presentan los tiempos obtenidos a través del código y de la integración numérica en la tabla 4.2. Dado que se observó una discrepancia inferior al 2%, se asumió una adecuada implementación de la parte determinística del operador de colisiones elásticas en el código OC.

	OC	Cálculo numérico
Energía cinética inicial [keV]	93	93
Energía cinética final [keV]	3,75	3,75
Tiempo [ms]	50,37	51,04

**Tabla 4.2:** Comparación del tiempo de simulación obtenido utilizando el término determinístico del operador de colisiones OC con respecto al cálculo numérico.

#### 4.3.2. Código CG

Análogamente, se calculó el tiempo que demora la termalización de un deuterón con 93 keV de energía inicial en base a la parte determinística del operador de colisiones elásticas CG implementado (ecuaciones 3.48 y 3.49). En este caso, se consideró exclusivamente la evolución energética, manteniendo constante el valor del pitch:

$$\lambda_n = \lambda_0. \quad (4.3)$$

$$W_n = W_0 - 2\nu_{Ee}\tau \left[ W_0 - \frac{1}{2}x_e \frac{\phi'(x_e)}{G(x_e)} T_e \right] - 2\nu_{Ei}\tau \left[ W_0 - \sum_j \frac{1}{2}x_j \frac{\phi'(x_j)}{G(x_j)} T_i \right]. \quad (4.4)$$

Los resultados se exhiben en la tabla 4.3, en donde incluso se observa una menor diferencia entre los tiempos obtenidos en relación al código OC (apartado 4.3.1). Así, queda demostrado el correcto funcionamiento de la parte determinística del operador de colisiones elásticas en el código CG.

	CG	Cálculo numérico
Energía cinética inicial [keV]	93	93
Energía cinética final [keV]	3,75	3,75
Tiempo [ms]	67,07	67,28

**Tabla 4.3:** Comparación del tiempo de simulación obtenido utilizando el término determinístico del operador de colisiones CG con respecto al cálculo numérico.

## 4.4. Trayectorias en presencia de colisiones

Se simularon las trayectorias de los deuterones en presencia de colisiones elásticas. En primera instancia, se evaluaron los códigos durante un tiempo de simulación de 1 ms, como se muestra en la tabla 4.4.

Con respecto al caso sin colisiones (tabla 4.1), se distingue un incremento en el tiempo de cómputo considerable en el código OC, mientras que esto no ocurre en el código CG. Además, como es esperable, aumenta la cantidad de partículas perdidas y disminuye la energía cinética promedio de las no perdidas.

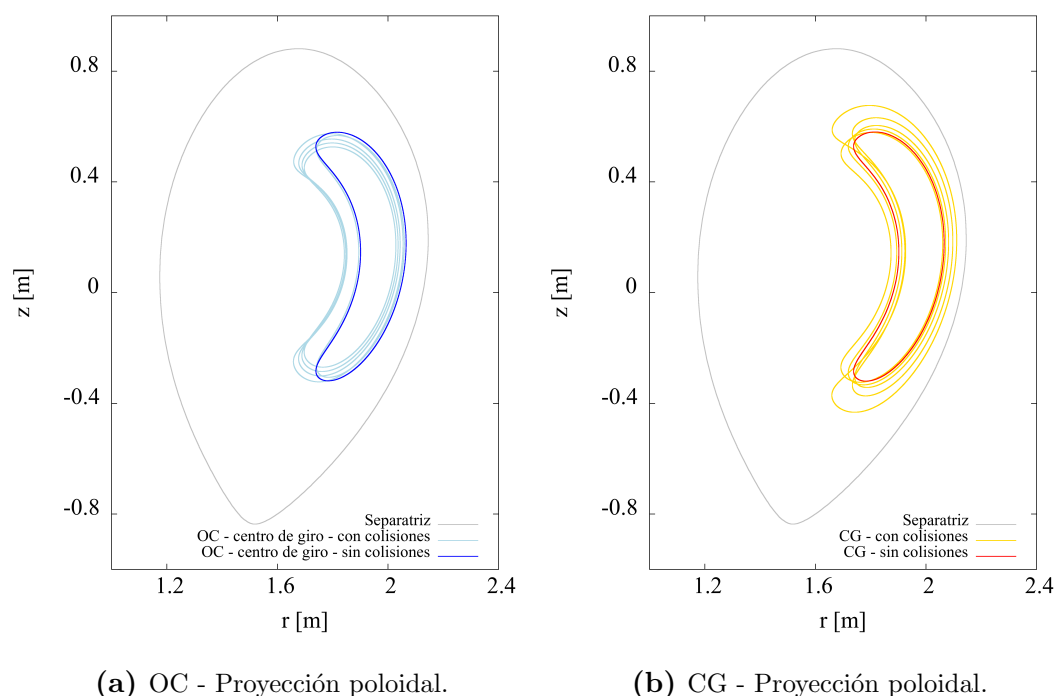
Con colisiones	OC	CG
Tiempo de simulación	1 ms	1 ms
Tiempo de cómputo	39 min 38 s	2 min 10 s
Partículas perdidas	10.730	2.957
Energía cinética promedio de las partículas no perdidas [keV]	91,44	91,53

**Tabla 4.4:** Simulación de 1 ms con ambos códigos en presencia de colisiones.

Para observar el efecto de las colisiones elásticas sobre las órbitas de los deuterones, se grafica en la figura 4.5 nuevamente la partícula atrapada mostrada en la figura 4.3, pero ahora en una simulación con colisiones. Se exageró la influencia de cada colisión a fin de poder contemplar a simple vista la deriva en la trayectoria.

Es inmediato reparar en el hecho de que los códigos producen resultados distintos. Esto se debe a que la colisión es un proceso estocástico, por ende, sería imposible

reproducir un mismo desplazamiento con ambos códigos. Sin embargo, la evolución de los parámetros principales de un conjunto de partículas, como la energía promedio, por ejemplo, sí debe coincidir entre ellos.



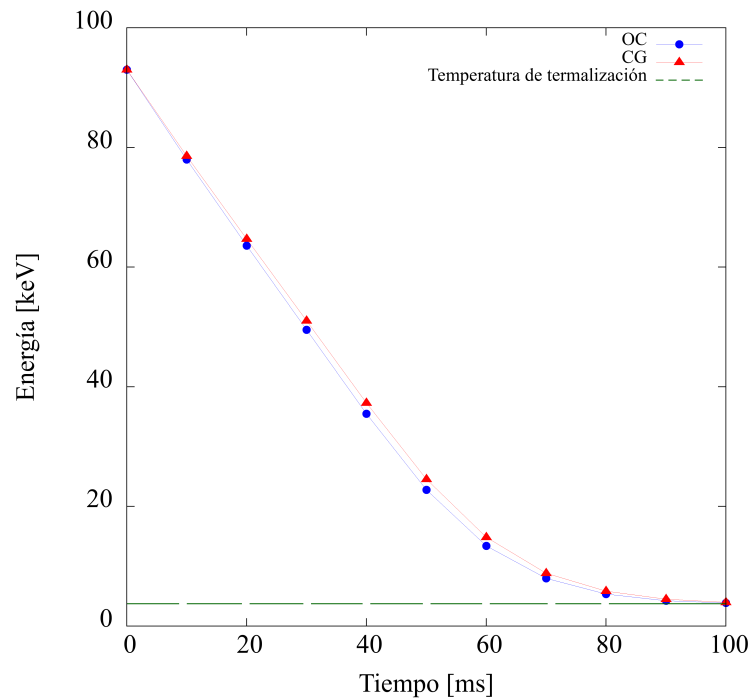
**Figura 4.5:** Trayectoria de la partícula atrapada mostrada en la figura 4.3, calculada ahora con ambos códigos en presencia de colisiones.

A modo de validación final del código CG, se sometieron ambos códigos a tiempos de simulación más extensos, en particular, 100 ms. Se expone la evolución temporal de la energía cinética promedio de las partículas no perdidas en la figura 4.6 y las condiciones finales en la tabla 4.5.

Con colisiones	OC	CG
Tiempo de simulación	100 ms	100 ms
Tiempo de cómputo	46 h 48 min	5 h 6 min
Partículas perdidas	18932	11985
Energía cinética promedio de las partículas no perdidas [keV]	3,87	3,98

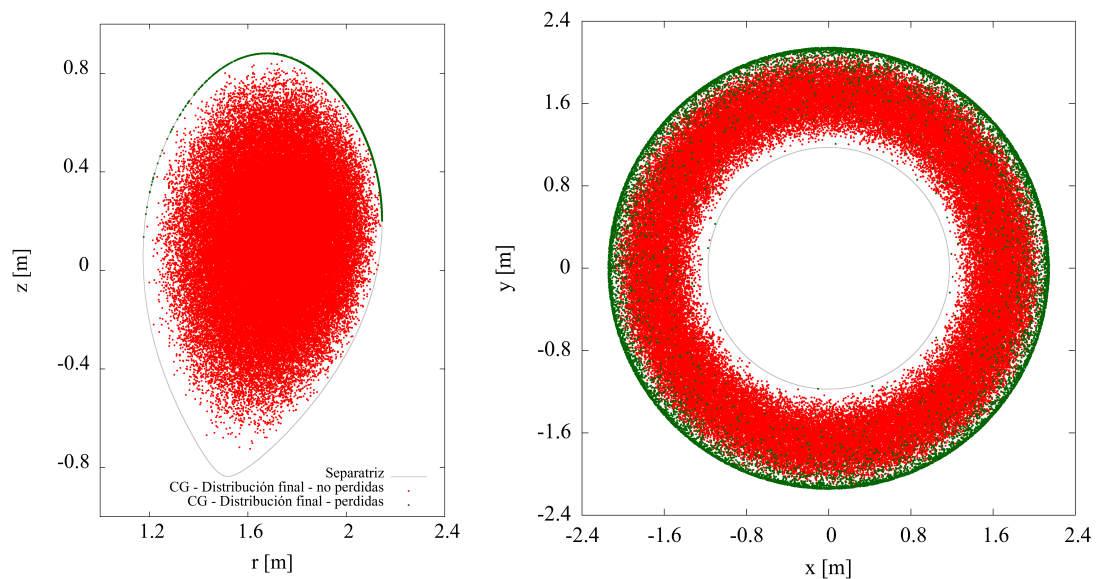
**Tabla 4.5:** Simulación de 100 ms con ambos códigos en presencia de colisiones.

De acuerdo con la evolución temporal de la energía, se observó un comportamiento similar en ambos códigos, recordando la mayor disipación exhibida por el código OC aunque a tiempos largos convergen a la temperatura de termalización. Con respecto al tiempo de cómputo, se ratificó la superioridad de aproximadamente un orden de magnitud a favor del código CG. Por otro lado, se registró nuevamente una disparidad en la cantidad de partículas perdidas.



**Figura 4.6:** Evolución temporal de la energía cinética promedio de las partículas simuladas no perdidas calculada con ambos códigos en presencia de colisiones durante un tiempo de 100 ms.

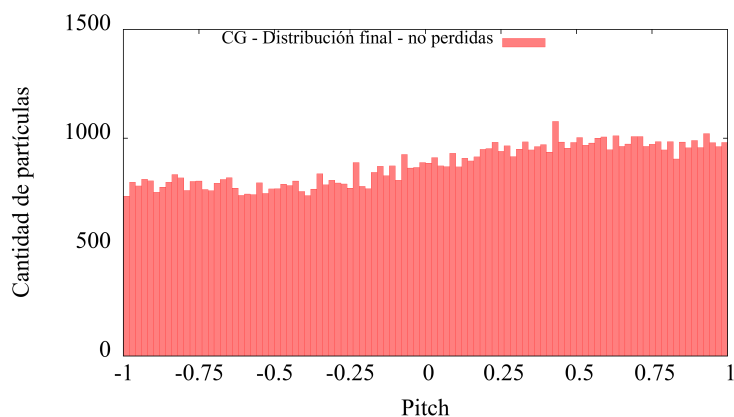
Finalmente, se concluyó que la implementación del código CG es correcta, produciendo resultados compatibles con los demostrados por su contraparte de órbita completa (siendo este un código ya probado) en un menor tiempo computacional.



(a) Proyección poloidal.

(b) Vista superior.

**Figura 4.7:** Distribución espacial de las partículas simuladas con el código CG luego de 100 ms en presencia de colisiones.

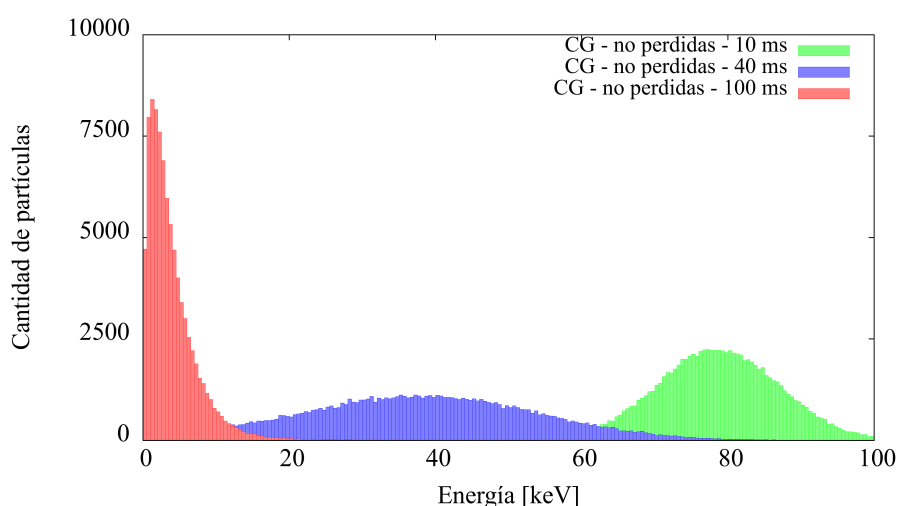


**Figura 4.8:** Distribución en pitch de las partículas simuladas con el código CG luego de 100 ms en presencia de colisiones.

Por completitud, se grafican las distribuciones espacial y en pitch finales de los deuterones en las figuras 4.7 y 4.8, respectivamente, calculadas con el código CG. Se destaca una mayor dispersión espacial en la proyección poloidal (figura 4.7a) en relación con la condición inicial (figura 4.1a), además de la presencia de las partículas perdidas más allá de la separatriz. En cuanto al pitch, claramente las colisiones producen una uniformización en la distribución.

#### 4.4.1. Distribución energética

Los deuterones inciden sobre el plasma de fondo con una energía inicial de 93 keV. En la figura 4.9, se presenta la evolución temporal obtenida con el código CG para la distribución energética de las partículas no perdidas.



**Figura 4.9:** Distribución energética de las partículas simuladas con el código CG en presencia de colisiones al transcurrir 10 ms, 40 ms y 100 ms .

Se parte de una función delta de Dirac centrada en 93 keV a tiempo cero, a partir de la cual el efecto de las colisiones produce un ensanchamiento en la distribución y

un corrimiento del valor promedio de la energía cinética hacia energías inferiores. Al transcurrir 10 ms, la distribución ressemble una función Gaussiana, mientras que, a los 40 ms, se percibe la presencia de una buena cantidad de partículas en un amplio rango energético. Por último, a los 100 ms, se advierte el apilamiento de los deuterones en bajas energías.

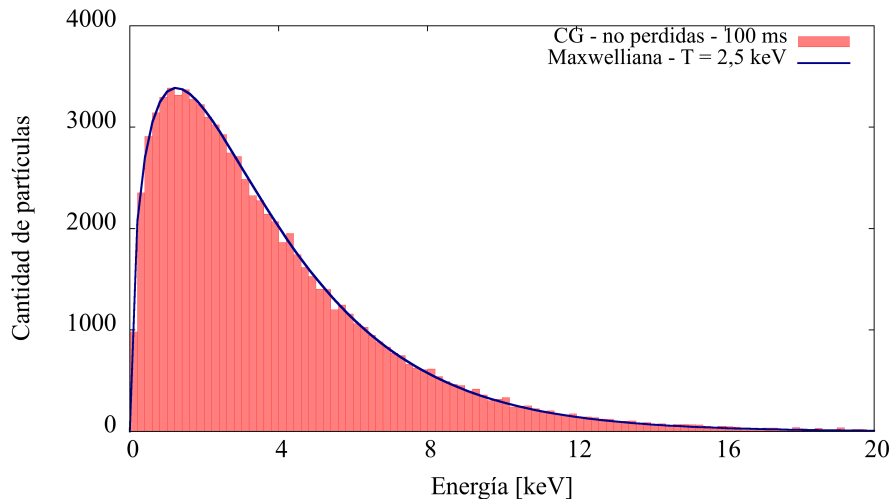
El aspecto de la distribución observada a los 100 ms se asemeja a una curva de Maxwell-Boltzmann. Efectivamente, es de esperarse que, luego de suficiente tiempo, el proceso colisionante produzca una relajación en la distribución energética hacia una Maxwelliana. Esto ocurre debido a que dicha distribución es la solución estacionaria de la parte energética del operador de colisiones elásticas generalizado (ecuación 3.36).

La función de probabilidad de la distribución de Maxwell-Boltzmann puede representarse como:

$$f_E(W) = A \sqrt{\frac{W}{\pi T^3}} e^{-\frac{W}{T}}. \quad (4.5)$$

En donde  $T$  es la temperatura promedio del plasma de fondo y  $A$  es una constante definida de tal manera de satisfacer la condición de que la integración de  $f_E(W)$  en todo el espacio de energías  $W$  sea el número total de partículas.

Se realizó el ajuste de una curva Maxwelliana con  $T = 2,5$  keV, la temperatura del plasma empleada en la simulación, sobre la distribución en energía final. Esto se muestra en la figura 4.10. En base a su estudio, es inmediata la confirmación de que ha transcurrido el mínimo tiempo requerido para obtener una Maxwelliana.

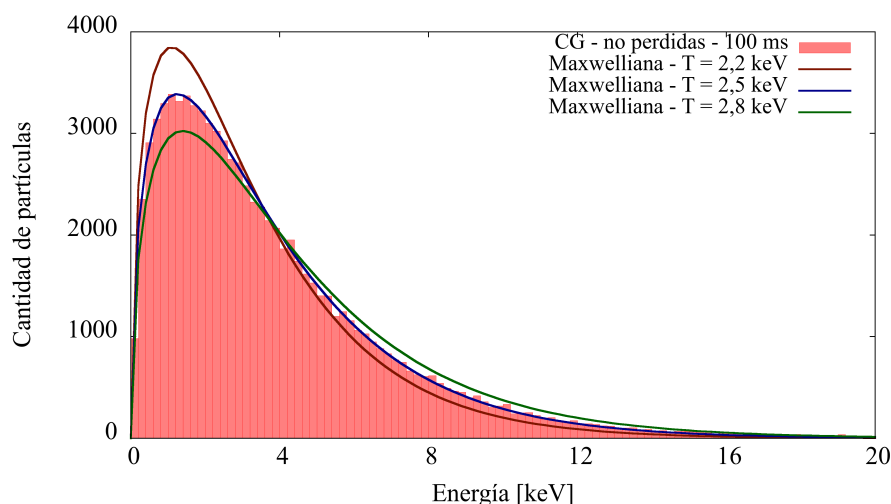


**Figura 4.10:** Distribución energética de las partículas simuladas con el código CG en presencia de colisiones luego de 100 ms junto con una curva Maxwelliana de ajuste para un plasma de 2,5 keV.

Además, se verificó el carácter predictivo que posee un ajuste de este tipo mediante la variación del parámetro  $T$ . En particular, se analizó la sensibilidad frente a cambios del orden de décimas de keV. Se presentan en la figura 4.11 ajustes para temperatu-



ras del plasma de fondo de 2,2 keV, 2,5 keV y 2,8 keV. Evidentemente, en caso de desconocer el valor de  $T$ , es posible estimarlo en 2,5 keV.



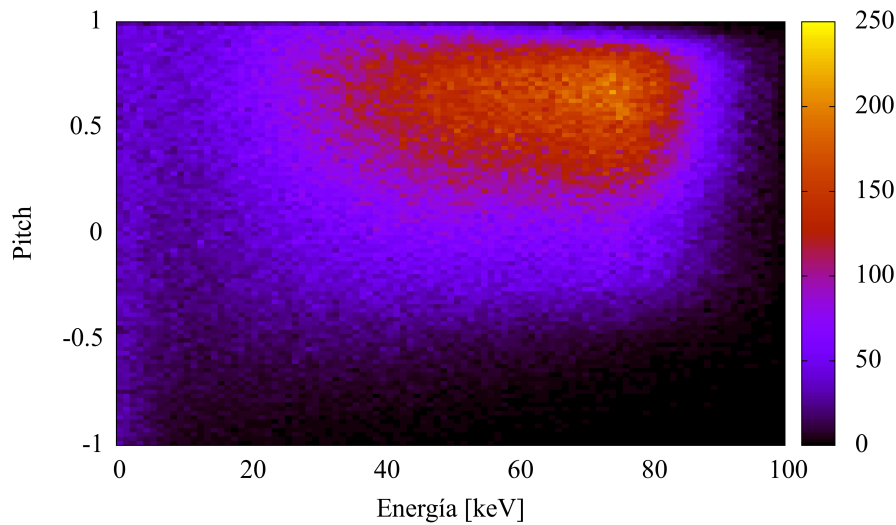
**Figura 4.11:** Distribución energética de las partículas simuladas con el código CG en presencia de colisiones luego de 100 ms junto con curvas Maxwellianas de ajuste para plasmas de 2,2 keV, 2,5 keV y 2,8 keV.

#### 4.4.2. Distribución en pitch

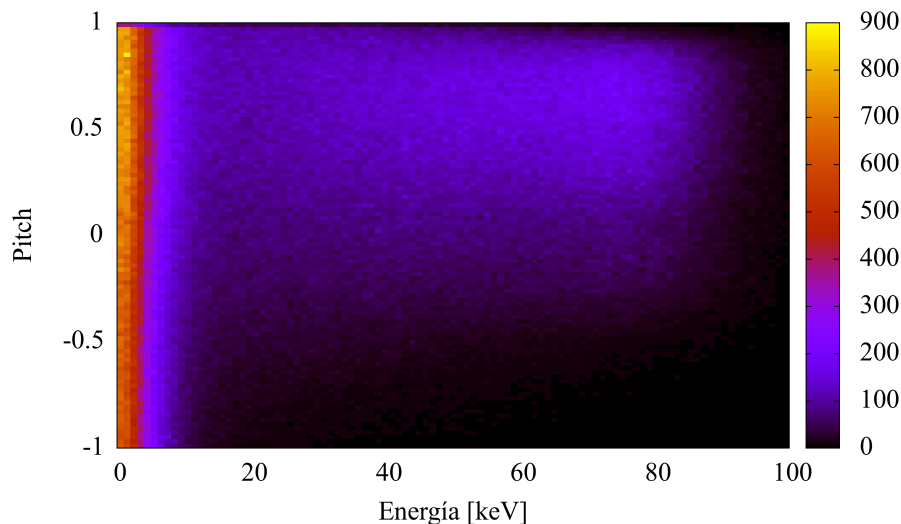
La distribución en pitch inicial de las partículas incidentes se presentó en la figura 4.2, y la distribución obtenida con el código CG en presencia de colisiones al cabo de 100 ms de simulación se puede observar en la figura 4.8. A partir de dichos histogramas, es fácil concluir que existe una tendencia de uniformización en el pitch con el transcurso del tiempo. Más allá de esto, también resulta interesante realizar gráficos pitch-energía, en los cuales se apilan “fotos” tomadas en distintos instantes temporales.

En la figura 4.12, se superponen cinco imágenes obtenidas con el código CG en presencia de colisiones correspondientes a los tiempos de simulación de 10 ms, 20 ms, 30 ms, 40 ms y 50 ms. La energía cinética promedio se representa en el eje de abscisas y el pitch en el eje de ordenadas. La imagen resultante se obtuvo como un histograma 2D, en donde se dividieron la energía y el pitch en cien intervalos cada uno dentro del rango mostrado, y se contaron los deuterones pertenecientes a cada zona. En caso de que la partícula se pierda, se deja de considerar en los pasos posteriores.

Se marca con un gradiente de colores la cantidad de partículas correspondiente a cada “cuadrado”. El operador de colisiones actúa sobre la población generando una disminución en la energía cinética promedio y una homogeneización en la distribución en pitch. Este efecto se acentúa a tiempos largos, como se muestra en la figura 4.13, en donde se agregaron cinco salidas adicionales equiespaciadas temporalmente entre 60 ms y 100 ms. Se alcanzó un nivel tal de termalización y uniformización en pitch que el resultado previo (figura 4.12) queda prácticamente opacado.



**Figura 4.12:** Gráfico pitch-energía calculado con el código CG en presencia de colisiones utilizando cinco salidas de datos equiespaciadas temporalmente entre 10 ms y 50 ms.

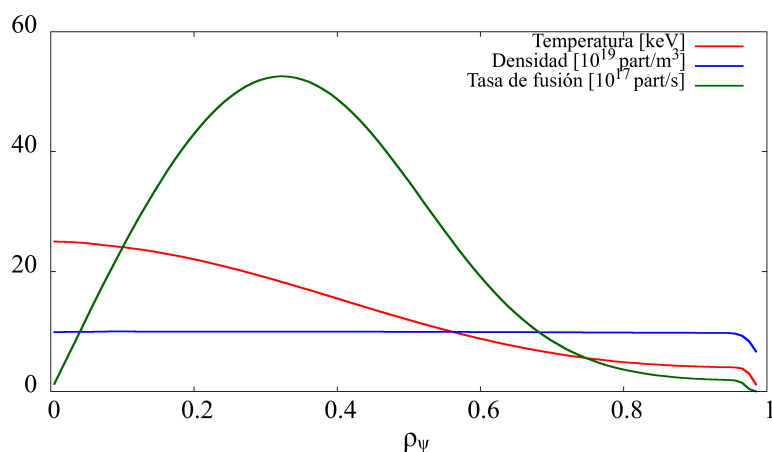


**Figura 4.13:** Gráfico pitch-energía calculado con el código CG en presencia de colisiones utilizando diez salidas de datos equiespaciadas temporalmente entre 10 ms y 100 ms.

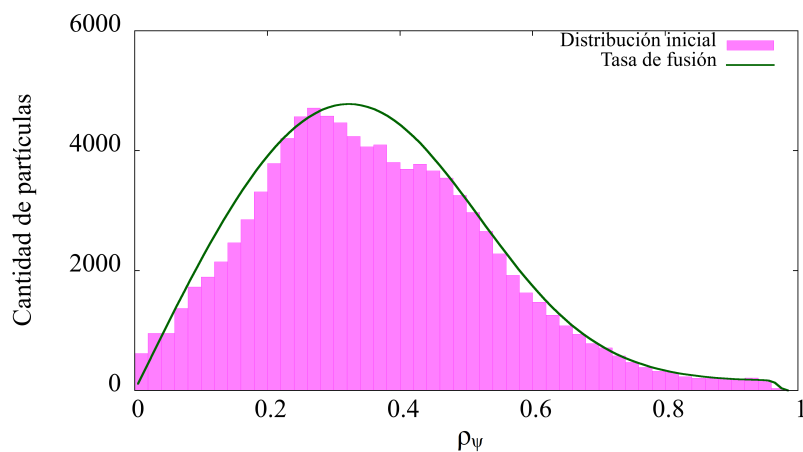
## 4.5. Distribución estacionaria de partículas $\alpha$ de fusión

### 4.5.1. Utilizando la distribución de frenamiento como condición inicial

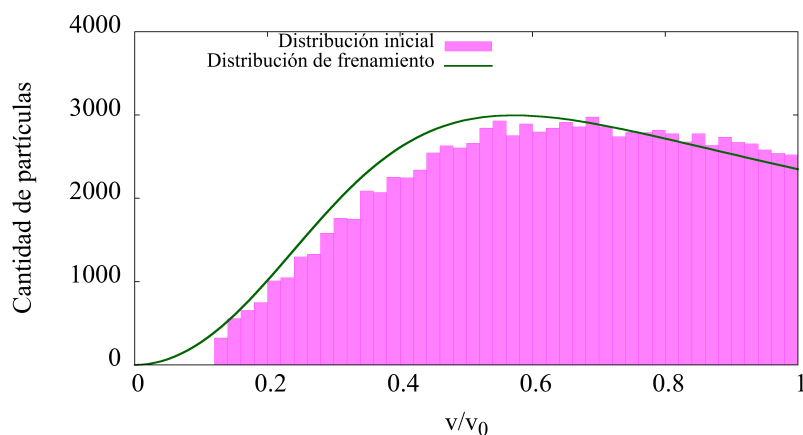
Empleando el código CG desarrollado, se estudió la evolución de una población de partículas  $\alpha$  provenientes de la fusión de deuterones y tritones (ecuación 1.3) en un tokamak con los parámetros del futuro reactor de ITER. Con este objetivo, se utilizó el campo magnético de equilibrio calculado por Montes [21] para un escenario estándar de operación con  $Q = 10$ , mientras que el campo eléctrico se consideró nulo. Se muestran



**Figura 4.14:** Perfiles de temperatura y densidad de los electrones en función de la coordenada de flujo poloidal utilizados para el estudio de la distribución de frenamiento. Además, se grafica la tasa de fusión  $S$ .



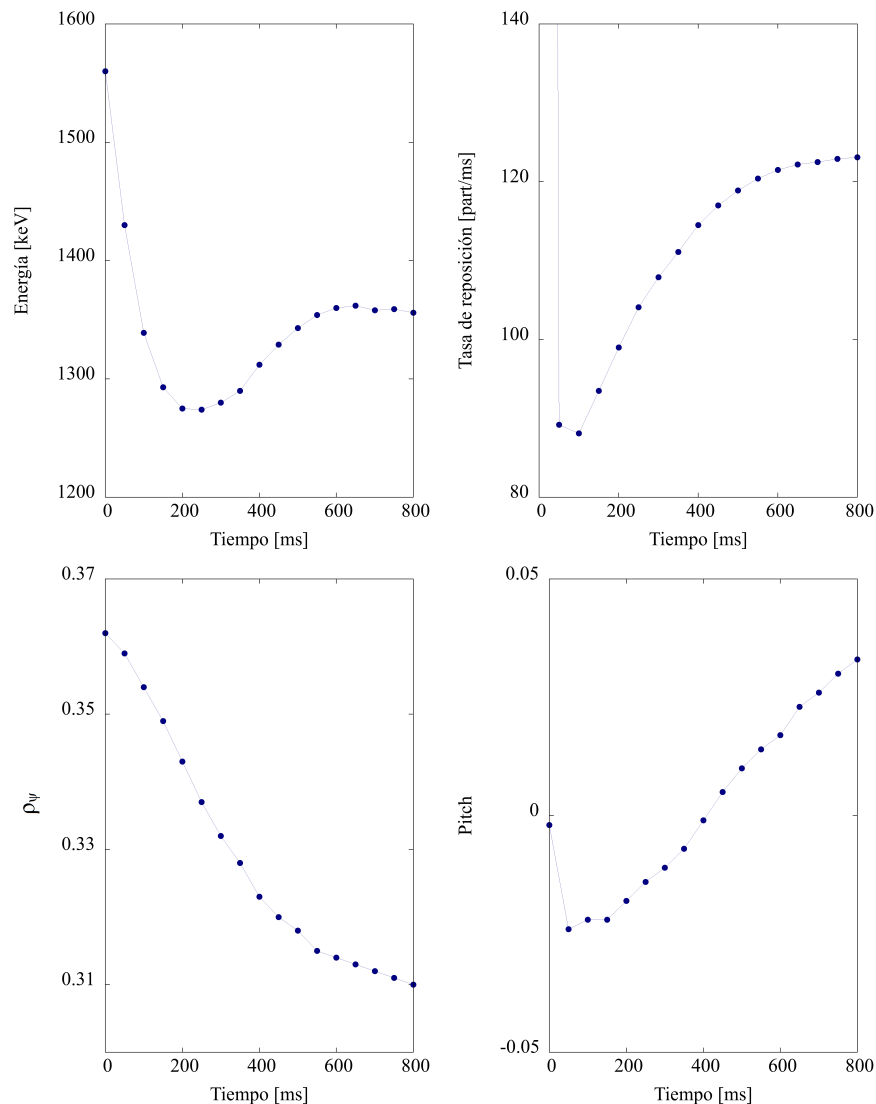
**Figura 4.15:** Distribución en  $\rho_\psi$  inicial de las partículas  $\alpha$  generadas con la tasa de fusión  $S$ .



**Figura 4.16:** Distribución energética inicial de las partículas  $\alpha$  generadas. La velocidad  $v$  se normalizó con el valor  $v_0$  correspondiente a un energía de 3,54 MeV y se incluye la distribución de frenamiento calculada analíticamente.

los perfiles de temperatura y densidad de los electrones en la figura 4.14, en función de la coordenada de flujo poloidal (ecuación 1.12), junto con la tasa de fusión  $S$  (ecuación 3.51). Se consideró que la temperatura de los iones es idéntica a la de los electrones y que la densidad de cada especie es igual y se corresponde a la mitad de la de los electrones.

En esta simulación, se inicializaron 100.000 partículas  $\alpha$  distribuidas espacialmente según  $S$ , y en energía de acuerdo a la distribución de frenamiento (ecuación 2.33), como se presenta en las figuras 4.15 y 4.16, respectivamente. El generador de partículas implementado fue adaptado con respecto al utilizado en el código FOCUS y funciona en conformidad con lo expuesto en el apartado 3.3.



**Figura 4.17:** Evolución temporal de los valores promedio de energía, tasa de reposición,  $\rho_\psi$  y pitch del conjunto de partículas  $\alpha$  simuladas.

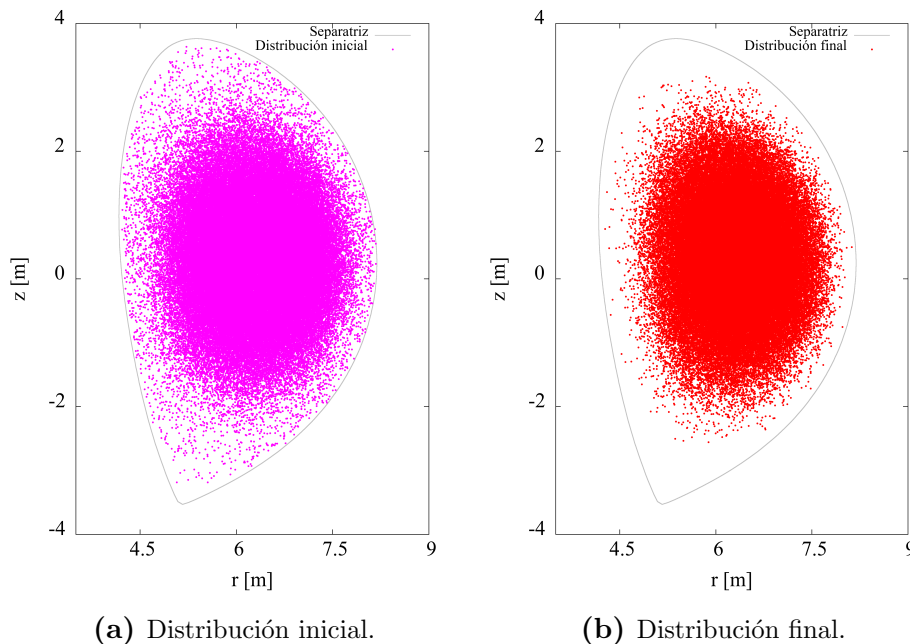
Dado que la distribución de frenamiento es una solución estacionaria para partículas con energías superiores a la del plasma de fondo, se define un “corte” en 50 keV. Esto es necesario ya que la componente térmica es de tal magnitud que opacaría la

distribución a altas energías. Entonces, las partículas  $\alpha$  cuya energía disminuye de los 50 keV (debido al efecto de las colisiones) son reemplazadas por nuevas partículas  $\alpha$  generadas por fusión, que se distribuyen espacialmente según  $S$  y nacen con 3,54 MeV. De igual manera se reponen las pérdidas, es decir, aquellas partículas que atraviesan la separatriz.

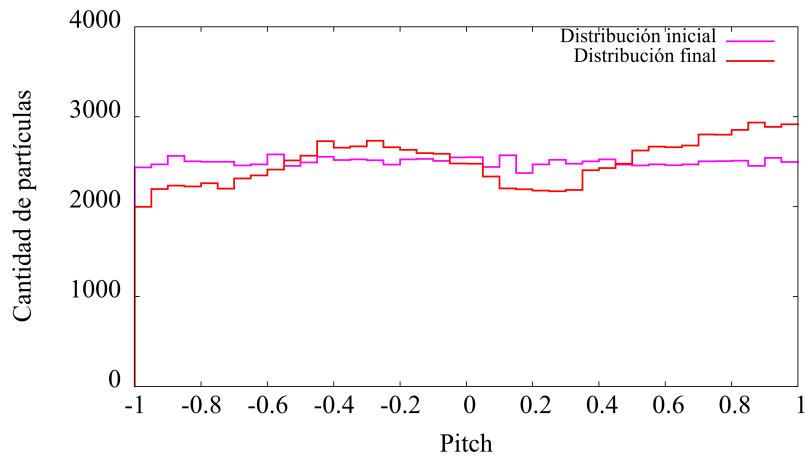
El propósito de este cálculo es alcanzar el estado estacionario, lo cual ocurrió alrededor de los 800 ms de simulación, demorando un tiempo de cómputo de 22 horas y 37 minutos. La evolución temporal de distintos parámetros característicos de la población se muestra en la figura 4.17. Los resultados obtenidos coinciden con los presentados por Clauser [6] para el código FOCUS de órbita completa confirmando nuevamente el correcto desempeño del código CG desarrollado.

En base a la figura 3.2, se puede realizar una estimación rápida del tiempo de cómputo que demandaría el código OC en esta situación. A partir de esto, se obtiene una demora de aproximadamente 500 horas ( $\approx 21$  días), lo que representa una espera más de veinte veces superior a la que requirió el código CG.

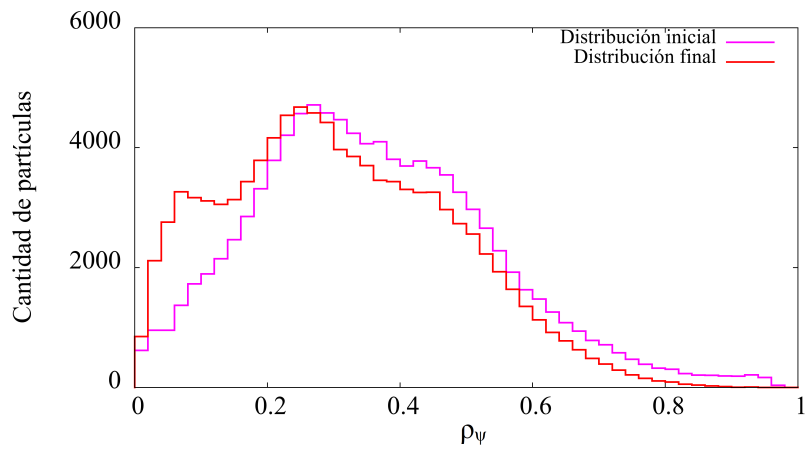
Se presenta una comparación entre las condiciones iniciales y finales en las figuras 4.18 a 4.21. Uno de los principales indicadores de la evolución de la población es la tasa de reposición, o sea, la cantidad de partículas que se regeneran. Inicialmente es elevada debido al reemplazo de las partículas nacidas en la zona cercana a la separatriz, las cuales pueden perderse por condiciones iniciales desfavorables o el efecto de las colisiones. Luego, tiende a un equilibrio mientras que la distribución espacial se centraliza, como se puede observar en las figuras 4.18 y 4.20.



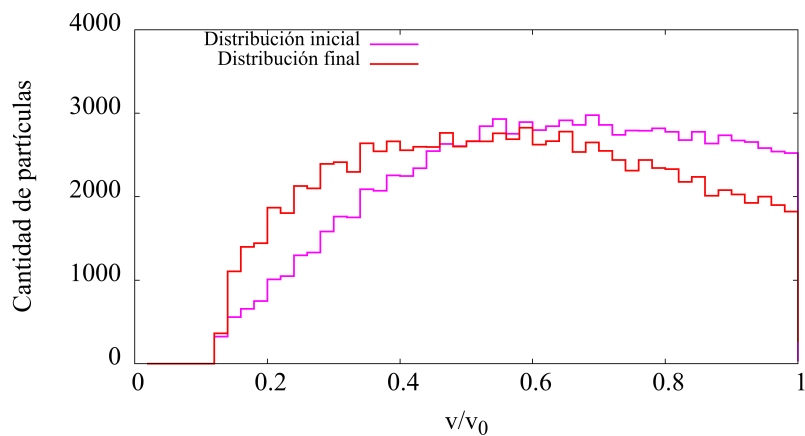
**Figura 4.18:** Proyección poloidal de las distribuciones inicial y final de las partículas  $\alpha$  simuladas.



**Figura 4.19:** Distribución en pitch inicial y final de las partículas  $\alpha$  simuladas.



**Figura 4.20:** Distribución en  $\rho_\psi$  inicial y final de las partículas  $\alpha$  simuladas.



**Figura 4.21:** Distribución energética inicial y final de las partículas  $\alpha$  simuladas. La velocidad se normalizó con el valor  $v_0$  correspondiente a un energía de 3,54 MeV.

Además de la tasa de reposición, se consideró a la energía promedio del conjunto de partículas  $\alpha$  como el otro parámetro clave para determinar si la población se encuentra en estado estacionario. Con respecto a su evolución temporal, se observa una disminu-

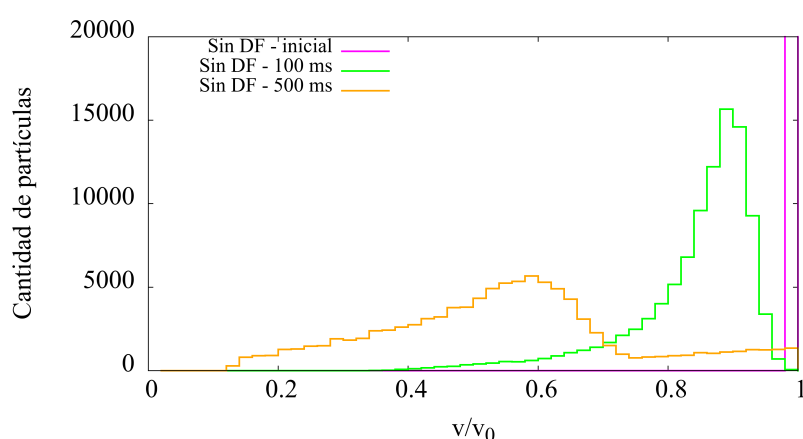
ción en cuanto a la condición inicial, un valle y posteriormente una estabilización. La condición final exhibe un corrimiento hacia menores energías, lo que se evidencia en la figura 4.21. Este es un resultado más representativo de la realidad en relación con el cálculo analítico, que es una aproximación.

En lo que refiere al pitch, el valor promedio muestra ciertas oscilaciones pero se mantiene alrededor del cero, verificando el hecho de que la velocidad de las  $\alpha$  se genera isotrópicamente.

#### 4.5.2. Sin utilizar la distribución de frenamiento como condición inicial

Por último, se analizó el tiempo de cómputo que demora alcanzar el estado estacionario sin la utilización de la distribución de frenamiento calculada analíticamente como condición inicial. Para esto, se inicializaron 100.000 partículas  $\alpha$  con una distribución espacial determinada por  $S$  pero con energías de 3,54 MeV.

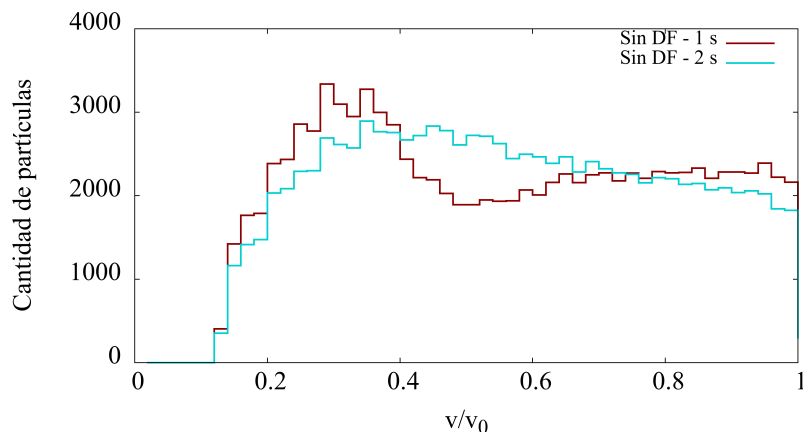
Entonces, la distribución energética comienza siendo una función delta de Dirac centrada en 3,54 MeV y con el transcurso del tiempo tiende a la distribución de frenamiento a causa del efecto de las colisiones, según se presenta en las figuras 4.22 y 4.23. La evolución inicial es similar a la obtenida cuando se estudió la distribución energética de la población de deuterones (apartado 4.4.1), sin embargo, el hecho de introducir un “corte” en 50 keV con su regeneración asociada, produce que las partículas  $\alpha$  tiendan a la distribución de frenamiento como estado estacionario final en lugar de a una curva Maxwelliana.



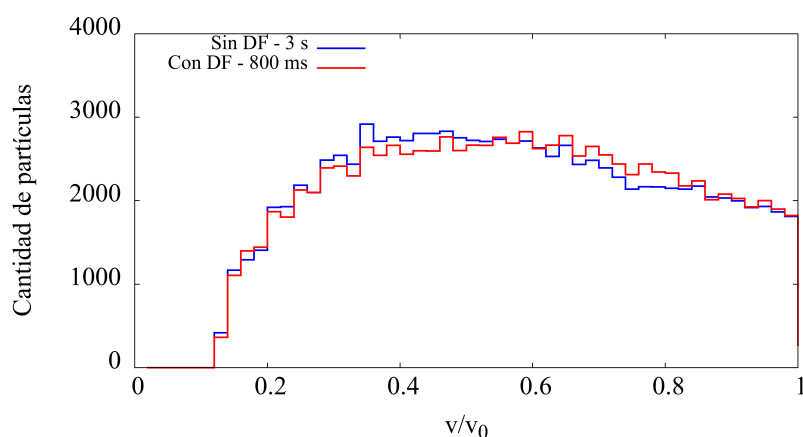
**Figura 4.22:** Distribución energética de las partículas  $\alpha$  simuladas sin utilizar la distribución de frenamiento (DF) como condición inicial a tiempos 0 (fuera de escala), 100 ms y 500 ms. La velocidad se normalizó con el valor  $v_0$  correspondiente a un energía de 3,54 MeV.

Mediante la observación de la evolución temporal de la población, se consideró que luego de 3 segundos de simulación el resultado obtenido es lo suficientemente

semejante al estado estacionario alcanzado previamente (empleando la distribución de frenamiento como condición inicial) como para concluir el cálculo. La comparación respectiva se realiza en la figura 4.24.



**Figura 4.23:** Distribución energética de las partículas  $\alpha$  simuladas sin utilizar la distribución de frenamiento (DF) como condición inicial luego de 1 s y 2 s. La velocidad se normalizó con el valor  $v_0$  correspondiente a un energía de 3,54 MeV.



**Figura 4.24:** Distribución energética de las partículas  $\alpha$  simuladas sin utilizar la distribución de frenamiento (DF) como condición inicial luego de 3 s. Se compara con el resultado obtenido previamente (figura 4.21). La velocidad se normalizó con el valor  $v_0$  correspondiente a un energía de 3,54 MeV.

En este caso, los 3 segundos de simulación corresponden a un tiempo de cómputo de 84 horas y 41 minutos, a lo largo del cual se regeneró la población equivalente en más de tres ocasiones (334.578 reemplazos). Si bien esta demora es considerablemente superior con respecto a la situación anterior, aquí se manifiesta la principal ventaja del código CG, ya que con el código OC se estima una espera de alrededor de 1875 horas ( $\approx 78$  días), a través la figura 3.2, para llevar a cabo el mismo cálculo. De esta manera, queda demostrada la eficiencia computacional del código CG desarrollado.



## 4.6. Trabajo futuro

El código CG generado puede emplearse para llevar a cabo estudios paramétricos de transporte y pérdida de iones energéticos. De esta manera, utilizando condiciones realistas, se puede estudiar la evolución de una población determinada.

A modo de incrementar el potencial del código, se propone incluir la posibilidad de simular campos eléctricos. Esto se realiza incorporando una ecuación que manifieste la dependencia entre  $\vec{E}$  y la energía de la partícula. Según ISDEP [17]:

$$\frac{dv^2}{dt} = \frac{2q}{m} (\vec{E} \cdot \vec{v}_\perp), \quad (4.6)$$

$$\vec{v} = \vec{v}_\parallel + \vec{v}_\perp. \quad (4.7)$$

La expresión 4.6 se agregaría a las ecuaciones de movimiento (de 3.31 a 3.34) completando el conjunto de cinco fórmulas para el estudio de las cinco variables  $(r_{cg}^\vec{r}, v_\parallel, W)$ . La validación del comportamiento resultante se puede efectuar utilizando a FOCUS como comparación.

También sería interesante implementar un operador de colisiones inelásticas, a partir del cual se puedan considerar eventos de cambio de carga. Así, el código CG contaría con todas las capacidades programadas en FOCUS.

Además, queda latente la oportunidad de generar un código CG-OC. El mismo buscaría aprovechar la ventaja computacional del código CG pero debería conmutar al código OC cuando el efecto del radio de Larmor sea importante, por ejemplo, en la zona cercana a la separatriz. Para esto, sería de utilidad realizar un estudio detallado del radio de Larmor de las partículas en función de las longitudes características del sistema.



# Capítulo 5

## Conclusiones

Se desarrolló un código de centro de giro que incluye un operador de colisiones elásticas con la capacidad de ser ejecutado en procesadores gráficos. Para esto, se empleó como punto de partida una versión sin colisiones previamente elaborada por Aguirre [8] y se utilizó como referencia el código FOCUS de órbita completa programado por Clauser [6]. La motivación de este trabajo se fundamenta en la ventaja computacional que presenta un código CG frente a su contraparte OC, manifestando diferencias de un orden de magnitud como mínimo en el tiempo de cómputo para una determinada simulación.

La implementación del operador de colisiones elásticas se basó en el cálculo teórico realizado por Chen [9], que permite la incorporación de distintas especies al plasma de fondo con el que colisionan las partículas simuladas mediante el código CG. Se realizaron distintos pasos de validación del operador, comenzando por la parte determinística y luego agregando el término estocástico. En primera instancia, se verificó el resultado obtenido a través de los códigos con una integración numérica de las ecuaciones empleadas.

Luego, utilizando condiciones iniciales arbitrarias y un ajuste numérico al campo magnético de ASDEX-U [20], se comprobaron los resultados obtenidos con los códigos CG y OC a partir de la simulación de trayectorias en ausencia y en presencia de colisiones. En consecuencia, quedó demostrado el correcto funcionamiento del código CG desarrollado. A continuación, se estudió la distribución energética y en pitch de una población de partículas dada. Cabe destacar que el mismo se programó considerando la compatibilidad entre ambos códigos con la finalidad de que sea sencillo combinarlos en una versión CG-OC en el futuro.

Por último, se estudió la distribución estacionaria de un conjunto de partículas  $\alpha$  nacidas de fusión en un escenario estándar de operación de ITER [10]. Con este objetivo, se incorporaron los campos de equilibrio calculados por Montes [21] y se adaptó el generador de partículas de FOCUS. En primer lugar, se utilizaron como condiciones

iniciales la tasa de fusión y la distribución de frenamiento calculada analíticamente, y se simuló con el código CG hasta alcanzar el estado estacionario. Se observó la evolución temporal esperada, actuando de esta manera como otra etapa de validación del código. Además, se destacó su velocidad mediante la obtención de resultados análogos pero empleando exclusivamente la tasa de fusión como condición inicial, en donde el cálculo demoró alrededor de 3 días y medio mientras que se estimó un tiempo de cómputo de aproximadamente 78 días en caso de recurrir a FOCUS para esta simulación.

# Apéndice A

## Práctica profesional supervisada (PPS) y actividades de proyecto y diseño (P&D)

### A.1. Práctica profesional supervisada (PPS)

El presente proyecto integrador fue dirigido por el Dr. Hugo Emilio Ferrari y tuvo lugar en la sección de Fusión Nuclear y Física de Plasmas del Centro Atómico Bariloche. Bajo su supervisión, el futuro ingeniero nuclear Agustín Gallo Claussi se integró en su grupo de trabajo efectuando las 400 horas mínimas de dedicación requeridas, de las cuales 200 corresponden a PPS y las otras 200 a actividades de P&D.

### A.2. Actividades de proyecto y diseño (P&D)

En primera instancia, se llevó a cabo un proceso de incorporación de los conceptos básicos de la fusión nuclear, con especial énfasis en los necesarios para realizar este trabajo. A su vez, se produjo una familiarización con los códigos CG y OC en lenguaje de programación C y se desarrollaron las habilidades necesarias para su manipulación.

Luego, se hizo una búsqueda bibliográfica con el propósito de hallar la manera de incluir un operador de colisiones elásticas en un código CG. Se identificaron tres papers promisorios, entre los cuales se incluyen ISDEP [17] y ASCOT [22], que ya son códigos CG probados. No obstante, se decidió recurrir a las bases teóricas y emplear el cálculo realizado por Chen [9]. El operador se incorporó en el código CG en C, a partir del cual se hicieron las primeras validaciones. Además, se utilizaron unidades atómicas para disminuir el error numérico, como es práctica común en los códigos de partículas.

El siguiente paso consistió en la paralelización del código CG. Con este objetivo, se estudió el lenguaje de programación CUDA, el cual permite la ejecución en procesadores

gráficos con un formato similar al de C. Entonces, tomando como referencia el código FOCUS [6], se desarrolló la versión en CUDA del código CG, a partir de la cual se estudió la evolución temporal de una población de deuterones con condiciones iniciales arbitrarias utilizando un ajuste numérico al campo magnético de ASDEX-U [20].

Finalmente, se empleó el código CG para obtener una distribución estacionaria de partículas  $\alpha$  nacidas de fusión aplicando los campos de equilibrio correspondientes a un escenario estándar de operación del futuro reactor de ITER [21]. Para lograr esto, se adaptó el generador de partículas de FOCUS y se estudió la evolución obtenida.

En lo que respecta a la presentación de resultados, el análisis de datos se realizó mediante códigos e histogramas escritos en lenguaje de programación C, mientras que las figuras y las integraciones numéricas se llevaron a cabo con programas específicos destinados a tal propósito.

# Bibliografía

- [1] Wikipedia, la enciclopedia libre. Energía de enlace nuclear. URL [https://es.wikipedia.org/wiki/energia\\_de\\_enlace\\_nuclear](https://es.wikipedia.org/wiki/energia_de_enlace_nuclear), accedido el 04/05/2023. vii, 2
- [2] Wesson, J. Tokamaks. *Clarendon Press - Oxford*, 2004. vii, 3
- [3] Wikipedia, la enciclopedia libre. Tokamak. URL <https://en.wikipedia.org/wiki/Tokamak>, accedido el 13/05/2023. vii, 6
- [4] Bruhn, C. Characterization of the turbulence driven boron transport in the core of fusion plasmas in the ASDEX Upgrade tokamak. *Department of Physics - Technische Universität München*, 2018. vii, 7
- [5] Sears, W., Zemansky, M. W. Física universitaria con física moderna. Volumen 2. *Pearson Educación*, 2009. vii, 12
- [6] Clauser, C. F. Dinámica de partículas alfa en plasmas magnetizados y el efecto de las colisiones en la interacción partícula-plasma. *Tesis Carrera de Doctorado en Física - Instituto Balseiro*, 2018. vii, vii, xiii, xv, 10, 14, 15, 17, 28, 29, 45, 51, 54
- [7] Schuster, E. Nuclear fusion and radiation. Lecture 7. *Lehigh University*, 2022. URL <https://www.lehigh.edu/~eus204/teaching/ME362/lectures/lecture07.pdf>, accedido el 25/05/2023. vii, 20
- [8] Aguirre, M. A. Estudio de pérdida de iones energéticos en tokamaks debido a inestabilidades magnetohidrodinámicas con un código de centro de giro. *Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas - Universidad de Buenos Aires*, 2021. xiii, xv, 10, 33, 51
- [9] Chen, T. S. A general form of the Coulomb scattering operators for Monte Carlo simulations and a note on the guiding center equations in different magnetic coordinate conventions. *Institute of Plasma Physics. Chinese Academy of Sciences*, 1988. xiii, xv, 25, 51, 53

- [10] ITER Organization. URL <https://www.iter.org/>, accedido el 13/05/2023. [xiii](#), [xv](#), [9](#), [51](#)
- [11] Clauser, C. F., Farengo, R., Ferrari, H. E. FOCUS: A full-orbit CUDA solver for particle simulations in magnetized plasmas. *Elsevier*, 2018. [10](#)
- [12] Pfefferlé, D., Graves, J. P., Cooper, W. A. Hybrid guiding-centre/full-orbit simulations in non-axisymmetric magnetic geometry exploiting general criterion for guiding-centre accuracy. *Plasma Physics and Controlled Fusion. Vol 57. Number 5*, 2015. URL <https://dx.doi.org/10.1088/0741-3335/57/5/054017>. [10](#)
- [13] Juda, J. D., et al. NRL Plasma Formulary. *Plasma Physics Division - Naval Research Laboratory*, 2019. URL [https://library.psfc.mit.edu/catalog/online\\_pubs/NRL\\_FORMULARY\\_19.pdf](https://library.psfc.mit.edu/catalog/online_pubs/NRL_FORMULARY_19.pdf), accedido el 26/06/2023. [16](#)
- [14] Berland, J., Bogey, C., Bailly, C. Low-dissipation and low-dispersion fourth-order Runge-Kutta algorithm. *Elsevier*, 2005. [21](#)
- [15] Cohen, B. I., et al. Time-step considerations in particle simulation algorithms for Coulomb collisions in plasmas. *Plasma Science. Volume 38*, 2010. [22](#)
- [16] Helander, P., Sigmar, D. J. Collisional transport in magnetized plasmas. *Cambridge Monographs on Plasma Physics*, 2002. [22](#)
- [17] Velasco, J. L., et al. ISDEP: Integrator of stochastic differential equations for plasmas. *Elsevier*, 2012. [24](#), [49](#), [53](#)
- [18] Boozer, A. H., Kuo-Petravic, G. Monte Carlo evaluation of transport coefficients. *Plasma Physics Laboratory. Princeton University*, 1981. [25](#)
- [19] Max Planck Institute for Plasma Physics. ASDEX Upgrade. URL <https://www.ipp.mpg.de/16195/asdex>, accedido el 27/04/2023. [31](#)
- [20] Mc Carthy, P. J. Analytical solutions to the Grad-Shafranov equation for tokamak equilibrium with dissimilar source functions. *Physics of Plasmas*, *6*, 1999. URL <https://doi.org/10.1063/1.873630>, accedido el 11/04/2023. [31](#), [51](#), [54](#)
- [21] Montes, P. E. Cálculo de equilibrios toroidales en plasmas de fusión nuclear. *Tesis de la Carrera de Maestría en Física - Instituto Balseiro*, 2017. [42](#), [51](#), [54](#)
- [22] Hirvijoki, E., et al. ASCOT: Solving the kinetic equation of minority particle species in tokamak plasmas. *Elsevier*, 2014. [53](#)