



**PARPRA:**  
**Código de parametrización de propiedades**  
**radiativas microscópicas de plasmas en el entorno**  
**GUIDE de MATLAB**

Guadalupe Espinosa Vivas

Tutores:

Dr. Rafael Rodríguez Pérez

Dr. Jose María Escobar Sánchez

# Índice general

<b>1</b>	<b>Introducción. Objetivos del trabajo.</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Marco teórico.</b>	<b>5</b>
2.1	Introducción. . . . .	5
2.2	Determinación de las poblaciones iónicas y de las propiedades radiativas en el plasma. . . . .	6
2.3	Propiedades radiativas medias. . . . .	9
2.3.1	Ionización media. . . . .	9
2.3.2	Opacidades medias de Rosseland y Planck. . . . .	10
2.3.3	Pérdida de potencia por radiación. . . . .	10
<b>3</b>	<b>Ajuste de propiedades radiativas de plasma.</b>	<b>12</b>
3.1	Introducción. . . . .	12
3.2	Generación de la base de datos de las propiedades radiativas. . . . .	12
3.3	Descripción de <b>PARPRA</b> . . . . .	14
3.3.1	Estructura de <b>PARPRA</b> . . . . .	14
3.3.2	Módulo para la generación de ficheros de entrada a partir de las bases de datos. . . . .	17
3.3.3	Módulo para la parametrización de las propiedades radiativas. . . . .	18
3.3.4	Módulo de representación gráfica. . . . .	21
3.4	Aplicaciones. . . . .	26
3.4.1	Módulo para la simulación de mezclas binarias. . . . .	26
3.4.2	Módulo de creación de mapas termodinámicos. . . . .	27
3.4.3	Módulo de diagnosis de temperatura en experimentos de plasmas astrofísicos reproducidos en laboratorio. . . . .	30
<b>4</b>	<b>Resultados. Desarrollo de la Interfaz Gráfica de Usuario PARPRA</b>	<b>35</b>
4.1	Introducción a la creación de una Interfaz Gráfica con MATLAB. . . . .	35
4.2	Introducción a los controles de una Interfaz de Usuario desarrollada con GUIDE. . . . .	36
4.3	Descripción de la interfaz desarrollada. . . . .	37

4.3.1	Ejemplo 1: <i>Ajuste de un plasma monocomponente y posterior representación gráfica.</i> . . . . .	39
4.3.2	Ejemplo 2: <i>Realización de un mapa termodinámico.</i> . . . . .	42
4.3.3	Ejemplo 3: <i>Diagnóstico de la temperatura.</i> . . . . .	44
4.3.4	Ejemplo 4: <i>Ejemplo de representación gráfica para un plasma multi-componente.</i> . . . . .	47
4.3.5	Descripción de la <i>Ayuda</i> de <b>PARPRA</b> . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Conclusiones, trabajos publicados y líneas futuras.</b>	<b>51</b>
5.1	Conclusiones. . . . .	51
5.2	Líneas futuras . . . . .	51
5.3	Comunicaciones a congresos y artículos publicados. . . . .	52

# Índice de figuras

3.1	Estructura de carpetas de la base de datos. . . . .	14
3.2	Diagrama de flujo de <b>PRINCIPAL</b> . . . . .	15
3.3	Diagrama de flujo de <b>APLICACIÓN</b> . . . . .	16
3.4	Ajuste de la pérdida de potencia por radiación . . . . .	20
3.5	Ejemplo de división del espacio de búsqueda de densidades y temperaturas siguiendo un método QuadTree. . . . .	22
3.6	Perfil de densidad electrónica experimental de una onda de choque radiante para diferentes instantes de tiempo. . . . .	31
4.1	Panel de control GUIDE. . . . .	36
4.2	Pantalla de presentación de la interfaz gráfica desarrollada. . . . .	38
4.3	Pantalla de opciones de tarea de la interfaz gráfica desarrollada. . . . .	38
4.4	Pantalla de ajuste de un plasma monodimensional de la interfaz gráfica desarrollada. . . . .	39
4.5	Pantalla de finalización de ajuste. . . . .	40
4.6	Pantalla de opciones de representación gráfica. . . . .	40
4.7	Ejemplo de representación tridimensional. . . . .	41
4.8	Ejemplo de representación bidimensional. . . . .	41
4.9	Ejemplo de representación gráfica de ionización media frente a temperatura para valores preelegidos de densidad. . . . .	42
4.10	Pantalla de elección de las densidades a representar. . . . .	42
4.11	Ejemplo de representación gráfica de ionización media frente a densidad para valores preelegidos de temperatura. . . . .	43
4.12	Pantalla de elección de las temperaturas a representar. . . . .	43
4.13	Pantalla de elección de variables para el mapa termodinámico. . . . .	44
4.14	Ejemplo de representación del mapa termodinámico del Kriptón. . . . .	44
4.15	Pantalla de estudio de la diagnosis de temperatura. . . . .	45
4.16	Pantalla de finalización de la diagnosis de temperatura. . . . .	46
4.17	Pantalla de representaciones de la diagnosis de temperatura. . . . .	46
4.18	Ejemplo de representación de la diagnosis de temperatura. . . . .	47
4.19	Mensaje de error: Opción no disponible. . . . .	48

4.20	Pantalla de elección de variables para un plasma multicomponente. . . . .	48
4.21	Pantalla de opciones de representación gráfica para un plasma multicomponente. . . . .	49
4.22	Ejemplo de representación tridimensional de opacidad media de Planck frente a densidad y temperatura. . . . .	49
4.23	Pantalla menú de ayuda. . . . .	50
4.24	Ejemplo del menú de ayuda. . . . .	50

# 1 Introducción. Objetivos del trabajo.

El estudio de las propiedades físicas de la materia ha sido uno de los grandes campos de trabajo de la Física del siglo XX y sigue siéndolo en la actualidad. Además de considerarse las propiedades de la materia en los estados de agregación sólido, líquido y gaseoso, desde la segunda mitad del pasado siglo se han dedicado muchos esfuerzos al estudio del estado de plasma. El creciente interés es debido a su importancia en la comprensión de los procesos de fusión y fisión nuclear para su aprovechamiento en la obtención de energía, a su importancia en el estudio de la estructura y evolución de las estrellas y demás objetos astrofísicos así como en sus múltiples aplicaciones tecnológicas entre las que habría que destacar, debido a su relevancia para la sociedad actual, la del procesamiento de materiales ya que los plasmas están presentes en las mayores industrias de manufacturación a nivel mundial, como son la industria armamentística, automoción, biomedicina, computación, tratamiento de residuos, la industria textil y del papel, la industria aeroespacial y las telecomunicaciones.

Cuando la materia ordinaria se somete a una temperatura suficientemente alta, las partículas que la componen, átomos y/o moléculas, adquieren la energía necesaria para romper las ligaduras que las mantenían unidas, de tal manera que los sólidos se convierten en líquidos y los líquidos en gases. Si la temperatura continúa aumentando las moléculas pueden llegar a disociarse y parte de los átomos se ionizarán, esto es, perderán algunos de los electrones ligados al núcleo atómico para dar lugar, de forma separada, a iones cargados positivamente y electrones libres. Estas partículas pueden ahora interaccionar entre sí a través de diferentes mecanismos o procesos atómicos. Los iones, por ejemplo, podrán emitir o absorber radiación electromagnética o intercambiar energía con los electrones libres mediante colisiones, alterando como consecuencia el estado energético de los electrones ligados. Además, las partículas de las que se habla están cargadas y, en consecuencia, cada una de ellas se verá afectada por los campos electromagnéticos de las demás o por los campos externos que puedan estar presentes. El conjunto de las interacciones electromagnéticas que se establecen entre las partículas componentes del plasma, que como es sabido son de largo alcance, y de los procesos atómicos de los que se ha hablado propicia en el sistema la aparición de fenómenos de tipo colectivo, como pueden ser el establecimiento de corrientes eléctricas o la aparición de conductas de carácter ondulatorio. Se dice entonces que se ha

formado un plasma. Así, se define un plasma como un sistema formado por constituyentes neutros, como átomos o neutrones, por constituyentes cargados, como iones, electrones o protones, y caracterizado por ciertas condiciones bajo las cuales se manifiestan de forma evidente comportamientos de tipo colectivo. El plasma es considerado el cuarto estado de la materia, además de los tres que nos resultan más familiares, sólido, líquido y gaseoso. Aunque es el más desconocido y el último que se ha estudiado en profundidad, es el estado que más abunda en el universo, estimándose que más del 99 % de la materia se encuentra en estado de plasma.

Para un estudio integral de los plasmas es necesario analizar la estructura de sus constituyentes mediante la aplicación de la física atómica al cálculo de los niveles energéticos de átomos e iones, así como las correspondientes energías y funciones de ondas, a partir de la ecuación de Dirac relativista o, de la de Schrödinger, en el caso no relativista. También son importantes las interacciones que sufren dichos constituyentes en el seno del plasma, que se obtienen mediante la aplicación de la física atómica al cálculo de las secciones eficaces de procesos colisionales y radiativos entre constituyentes como, por ejemplo, la ionización colisional que experimenta un ión por el impacto de un electrón o la excitación de un ión por absorción de un fotón. También conviene analizar las poblaciones o abundancias de los distintos constituyentes. En este caso se utiliza la física del transporte para la determinación de la distribución, en el espacio y en el tiempo, de las abundancias de átomos e iones a partir de las ecuaciones de tasas o cinéticas, y para la determinación de la distribución de la intensidad de fotones a partir de la ecuación de transporte radiativo. Finalmente, desde una descripción macroscópica, también es necesario establecer las relaciones entre las propiedades macroscópicas de la materia en estado de plasma mediante la física estadística para el cálculo de las ecuaciones de estado. A todo esto se puede añadir el estudio evolutivo, espacial y temporal, de los campos de densidad, temperatura o presión, entre otros, bajo ciertas condiciones iniciales y de contorno. En este problema se emplearían las ecuaciones hidrodinámicas de la materia en general en interacción con la radiación electromagnética. Como se puede apreciar la complejidad del problema es enorme, más aún si se tiene en cuenta que las ecuaciones comentadas anteriormente están acopladas entre sí.

En cualquier caso, tanto en la descripción macroscópica como en la microscópica del plasma, la determinación de las propiedades radiativas del mismo, esto es de magnitudes que caracterizan la emisión o la absorción de radiación (fotones) por los componentes del plasma, es una tarea fundamental e indispensable. Sin embargo, y tal y como se mostrará en el próximo capítulo, el cálculo de las mismas es un problema computacional complejo y que entraña un importante consumo de tiempo de cálculo ya que se requiere resolver un número muy elevado (del orden de 50000 o más) de ecuaciones acopladas no lineales por cada una de las condiciones de densidad y temperatura del plasma considerada, y estas pueden ser muchas también. Por ello, existen en la bibliografía expresiones analíticas para su cálculo basadas en ajustes uniparamétricos en función de la temperatura pero no de la densidad. Sin embargo, estos ajustes adolecen de ser válidos únicamente en lo que se

conoce como Equilibrio Corona, una aproximación válida sólo en plasmas de muy baja densidad y alta temperatura. Además, los modelos atómicos que subyacen a los cálculos de las propiedades radiativas a ajustar son en general muy simples con lo que reducen aún más la fiabilidad de dichos ajustes.

En general, la mayoría de las magnitudes del plasma dependen del instante de tiempo  $t$  y del punto del espacio  $\mathbf{r}$  considerados. Así, podemos hablar de una densidad iónica y una temperatura locales e instantáneas,  $n_{ion}(\mathbf{r}, t)$  y  $T(\mathbf{r}, t)$ , respectivamente. Podemos definir la longitud característica del plasma,  $L_{plasma}$ , como

$$L_{plasma} = \left| \frac{n_{ion}}{\nabla n_{ion}} \right| \quad \text{o} \quad L_{plasma} = \left| \frac{T}{\nabla T} \right|. \quad (1.1)$$

Si el plasma ocupa un volumen  $V \sim L^3$  y se verifica  $L < L_{plasma}$ , se podrá considerar que el plasma es homogéneo. Por otra parte, definiendo el tiempo característico del plasma,  $t_{plasma}$ , como

$$t_{plasma} = \left| \frac{n_{ion}}{\partial n_{ion} / \partial t} \right| \quad \text{o} \quad t_{plasma} = \left| \frac{T}{\partial T / \partial t} \right|. \quad (1.2)$$

Si el tiempo medio del proceso atómico con mayor tasa en el plasma es inferior al tiempo del plasma se puede considerar que este es estacionario. Esta aproximación se usa frecuentemente para calcular la distribución de población y posteriormente distintas propiedades radiativas del plasma. La aproximación es válida en muchos de los plasmas generados en el laboratorio y en casi todos los plasmas astrofísicos. Finalmente, si el camino libre medio de un fotón en el plasma, esto es, el recorrido medio del fotón en el plasma antes de ser absorbido, es mayor que la longitud  $L$  del plasma, entonces este se puede considerar ópticamente delgado.

Este trabajo se restringe a situaciones en las que los plasmas se pueden considerar homogéneos, en situación estacionaria y ópticamente delgados. El objetivo fundamental es proporcionar un método para la parametrización de las propiedades radiativas de plasmas de fusión y astrofísicos en función de las condiciones de densidad y temperatura de los mismos que evite las restricciones de aplicabilidad citadas anteriormente de las parametrizaciones disponibles en la bibliografía. Como objetivos secundarios se tienen, en primer lugar, la aplicación de estos ajustes, que se hacen para plasmas monocomponentes, para estudiar las propiedades de plasmas multicomponentes constituidos por elementos cuyas propiedades radiativas han sido previamente ajustadas. En segundo lugar, la parametrización permitirá obtener los mapas termodinámicos de los plasmas de los elementos en los que se esté interesado en función de las condiciones de densidad y temperatura del plasma bajo análisis. En tercer lugar, la parametrización permitirá realizar diagnóstico de temperatura de plasmas astrofísicos obtenidos en laboratorio en cierto tipo de experimentos concretos en los que participa el grupo GIRMA. Finalmente, también ha sido un objetivo crear un paquete computacional para la parametrización que sea sencillo y cómodo para el usuario para lo cual se han integrado los códigos que conforman dicho paquete (desarrollados en



MATLAB) en un entorno visual basado en un interfaz gráfico muy sencillo haciendo uso de la herramienta GUIDE de MATLAB.

Esta memoria se encuentra estructurada, por tanto, de la siguiente forma: en el Capítulo 2 se presenta el marco teórico en el que se ha desarrollado este trabajo, presentando las ecuaciones fundamentales y definiendo las propiedades radiativas que fueron ajustadas, así como una breve descripción del código empleado para el cálculo de las bases de datos que se van a parametrizar posteriormente. El Capítulo 3 está dedicado a presentar el método desarrollado para la parametrización de las propiedades radiativas así como a la descripción y comentario de los códigos desarrollados para ello y de la interfaz gráfica creada para el fácil manejo por parte del usuario. En el Capítulo 4 se presentan y analizan algunos ejemplos de parametrización de propiedades radiativas de plasmas mono y pluricomponentes y aplicaciones de las mismas. Finalmente, en el Capítulo 5 se presentan las principales conclusiones del trabajo, los resultados a los que ya ha dado lugar en forma de publicaciones internacionales y comunicaciones a congresos, y las líneas futuras.

## 2 Marco teórico.

### 2.1 Introducción.

En una gran cantidad de situaciones de interés tanto astrofísico como de fusión inercial o en las aplicaciones industriales de plasmas la descripción macroscópica de los mismos, esto es, el estudio evolutivo temporal y espacial de los campos de densidad, temperatura o presión entre otros bajo ciertas condiciones iniciales y de contorno, puede hacerse empleando las ecuaciones hidrodinámicas de un fluido monoparticular que puede estar cargado, portar corrientes eléctricas e interactuar con la radiación. En esta última situación, en donde la radiación afecta notoriamente la evolución macroscópica del mismo y que debido a su interés actual ha dado lugar a un campo de trabajo denominado hidrodinámica radiativa, es en donde las propiedades radiativas del plasma juegan un papel primordial.

Sin embargo, la simulación hidrodinámica de un plasma requiere para cada condición de densidad y temperatura el cálculo de las poblaciones de los niveles atómicos presentes en el plasma y de las propiedades radiativas del mismo. Teniendo en cuenta que la cantidad de condiciones a simular puede ser muy elevado, que el número de poblaciones de nivel atómicos es enorme y que las propiedades radiativas además hay que calcularlas para cada valor de frecuencia de fotón considerado, la simulación hidrodinámica *on-line* se vuelve extremadamente compleja e inabordable computacionalmente y requiere de ciertas aproximaciones para realizarla. Entre ellas está la parametrización de las propiedades radiativas en función de la densidad y de la temperatura. En el próximo apartado se presentará brevemente el modelo teórico común existente en la Física de Plasmas para el cálculo de las propiedades radiativas, comenzando con el cálculo de las poblaciones de nivel atómicas del plasma, para a continuación definir las dos propiedades radiativas fundamentales: la emisividad y la opacidad monocromáticas, que dan cuenta de la emisión y de la absorción de la radiación por parte del plasma, respectivamente. En un apartado posterior, y a partir de las propiedades radiativas monocromáticas se definirán las propiedades radiativas medias comúnmente empleadas en las simulaciones hidrodinámicas y que serán, además, objeto de parametrización de este trabajo.

## 2.2 Determinación de las poblaciones iónicas y de las propiedades radiativas en el plasma.

En la situación más general un plasma se encuentra en lo que se conoce como no-equilibrio local termodinámico (NELT), en donde los componentes del plasma, esto es iones, electrones y fotones no tienen por qué estar en equilibrio local entre sí. En este caso, la distribución de poblaciones bajo condiciones NLTE no puede determinarse a partir de principios básicos, y sólo podrá conocerse tras resolver un conjunto de ecuaciones de tasas que tienen en cuenta todos los procesos atómicos capaces de incrementar o disminuir la población de un estado particular. El modelo comúnmente empleado para ello es el llamado modelo colisional-radiativo, CR [1,2].

El punto de partida es el conjunto de las ecuaciones de tasas más la ecuación de transferencia radiativa,

$$\frac{\partial N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta' m'}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+ - \sum_{\zeta' m'} N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t) \mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-, \quad (2.1)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e})}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) = -\kappa(\mathbf{r}, t, \nu) I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e}) + j(\mathbf{r}, t, \nu), \quad (2.2)$$

donde  $N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)$  es la población del nivel atómico  $m$  del ion de carga  $\zeta$ , en el punto  $\mathbf{r}$  en el instante  $t$  y  $\mathbb{R}_{\zeta' m' \rightarrow \zeta m}^+$  y  $\mathbb{R}_{\zeta m \rightarrow \zeta' m'}^-$  denotan las tasas de los procesos atómicos que pueblan y despueblan, respectivamente, el nivel  $m$  del ion  $\zeta$ . En la ecuación de transferencia radiativa  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío,  $\nu$  la frecuencia del fotón,  $I(\mathbf{r}, t, \nu, \mathbf{e})$  es la intensidad específica de la radiación propagándose en la dirección  $\mathbf{e}$  y  $\kappa(\mathbf{r}, t, \nu)$  y  $j(\mathbf{r}, t, \nu)$  son los coeficientes de absorción y emisión, respectivamente. En el caso más general, para poder obtener las poblaciones  $N_{\zeta m}(\mathbf{r}, t)$  en cada punto del espacio y en cualquier instante de tiempo, sería necesario resolver las ecuaciones anteriores de forma autoconsistente, ya que las ecuaciones de tasas están acopladas entre sí y además también la ecuación de transferencia radiativa ya que los coeficientes de emisión y de absorción dependen de las poblaciones de nivel atómicas en el plasma.

Tanto en el coeficiente de absorción como en el de emisión existen contribuciones de transiciones de tres tipos:

- Transiciones ligado-ligado (*bb*). Un fotón del campo de radiación cuya energía coincide con la diferencia entre dos estados iónicos ligados es absorbido (o emitido), produciendo una transición desde el estado de menor (mayor) energía al de mayor (menor) energía.
- Transiciones ligado-libre (*bf*). La energía de un fotón del campo de radiación es utilizada por un electrón ligado para escapar al continuo, produciendo una ionización o un electrón libre pasa a convertirse en ligado de un ion emitiendo un fotón.

- Transiciones libre-libre ( $ff$ ). Transiciones electrónicas entre estados libres, en donde tanto se puede absorber o emitir un fotón.

Por tanto, los coeficientes de emisión y de absorción, en un punto dado y para un instante de tiempo determinado, se podrán expresar como la suma de esas tres contribuciones,

$$j(\nu) = j_{bb}(\nu) + j_{bf}(\nu) + j_{ff}(\nu) \quad (2.3)$$

$$\kappa(\nu) = \kappa_{bb}(\nu) + \kappa_{bf}(\nu) + \kappa_{ff}(\nu). \quad (2.4)$$

La emisividad ligado-ligado viene dada por

$$j_{bb}(\nu) = \sum_{\zeta} \sum_{i,j} j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\nu), \quad (2.5)$$

donde la suma se realiza sobre todos los estados de carga del átomo presentes en el plasma y sobre todos los niveles ligados de cada ion y siendo

$$j_{\zeta j \rightarrow \zeta i}(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N_{\zeta j} \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \phi_{ji}(\nu). \quad (2.6)$$

con  $h$  la constante de Planck,  $\phi(\nu)$  representa el perfil de línea y  $\mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i}$  el coeficiente de Einstein del decaimiento espontáneo entre los niveles ligados  $ji$  del ion de carga  $\zeta$  [3]. De forma análoga, para la absorción ligado-ligado tenemos

$$\kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta j}(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N_{\zeta i} \frac{g_{\zeta j}}{g_{\zeta i}} \frac{c^2}{2h\nu_{ij}^3} \mathcal{A}_{\zeta j \rightarrow \zeta i} \phi_{ij}(\nu) \left(1 - \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta j}} \frac{N_{\zeta j}}{N_{\zeta i}}\right). \quad (2.7)$$

con  $g_{\zeta j}$  y  $g_{\zeta i}$  los pesos estadísticos de los niveles  $j$  e  $i$  del ion de carga  $\zeta$ .

La emisividad ligado-libre se determina de la siguiente manera:

$$j_{bf}(\nu) = \sum_{\zeta,i} \sum_{\zeta,j} j_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\nu), \quad (2.8)$$

siendo

$$j_{\zeta+1j \rightarrow \zeta i}(\nu) = \frac{h}{2\pi c^2} \left(\frac{1}{2m_e}\right)^{3/2} N_{\zeta+1j} n_e f(\varepsilon) \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j}} \frac{(h\nu)^3}{\varepsilon^{1/2}} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu). \quad (2.9)$$

donde  $n_{ef}$  es la densidad de electrones libres,  $\varepsilon$  es la energía del estado libre del electrón,  $m_e$  la masa del electrón,  $f(\varepsilon)$  es la distribución de Maxwell-Boltzmann de energía de los electrones libres del plasma y  $\sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu)$  es la sección eficaz de fotoionización [3].

La absorción ligado-libre viene dada por:

$$\kappa_{bf}(\nu) = \sum_{\zeta,i} \sum_{\zeta,j} \kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\nu) \quad (2.10)$$

con

$$\kappa_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}(\nu) = N_{\zeta i} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu) \left[1 - \frac{N_{\zeta+1j} n_e f(\varepsilon)}{N_{\zeta i}} \frac{g_{\zeta i}}{g_{\zeta+1j} g(\varepsilon)}\right], \quad (2.11)$$

donde  $g(\varepsilon)$  es la densidad de estados con energía  $\varepsilon$  del gas ideal de electrones libres, dada por:

$$g(\varepsilon) = 4\pi \left( \frac{2m_e}{h^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \quad (2.12)$$

El coeficiente de emisión para transiciones libre-libre se evalúa como [4]

$$j_{ff}(\nu) = \frac{h\nu}{4\pi} n_e \sum_{\zeta} N_{\zeta} \int_{h\nu}^{\infty} \frac{d\sigma_{\zeta}^{bre}}{d\nu} \left( \frac{2\varepsilon}{m_e} \right)^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.13)$$

donde  $\frac{d\sigma_{\zeta}^{bre}}{d\nu}$  es la sección eficaz diferencial de bremsstrahlung. En ocasiones, la ecuación anterior se corrige multiplicando por el factor Gaunt libre-libre  $g_{ff}$ , incluyendo así efectos cuánticos no-relativistas. El coeficiente de absorción libre-libre viene dado por [4]

$$\kappa_{ff}(\nu) = \sum_{\zeta} N_{\zeta} \sigma_{\zeta}^{ibr}(\nu) \left( 1 - e^{-h\nu/T} \right). \quad (2.14)$$

Queda patente, pues, la fuerte dependencia de las propiedades radiativas de las magnitudes atómicas y de la distribución de poblaciones en el plasma. Realmente, estos tres aspectos están acoplados e interdependientes y por tanto deberían ser resueltos de forma simultánea y autoconsistentemente. Por todo ello, la resolución de un modelo colisional-radiativo es una tarea ardua y con un alto coste computacional, teniendo en cuenta el elevadísimo número de niveles y transiciones implicadas. Esto ha conducido a la necesidad de desarrollar métodos aproximados para la resolución de los modelos CR.

Existen, sin embargo, dos situaciones en las que el problema se simplifica considerablemente. Una de ellas es el estado estacionario conocido como Equilibrio Local Termodinámico (ELT) en el que los electrones y los iones del plasma están en equilibrio entre ellos mientras que los fotones no. La situación ELT ocurre en los plasmas cuyas dimensiones son significativamente más pequeñas que el camino libre medio de los fotones emitidos en su interior, pero mucho mayores que la longitud recorrida por los electrones entre colisiones con un ion. Esto suele darse en situaciones de alta densidad, esto es en plasmas de interiores estelares y de fusión por confinamiento inercial. En este caso, las poblaciones iónicas pueden calcularse a partir de principios básicos a través de la resolución de las ecuaciones de Saha-Boltzmann [5]. La segunda situación se corresponde con otro estado de equilibrio estacionario denominado Equilibrio Corona (EC), que suele darse en situaciones en las que la densidad del plasma es muy baja y la temperatura moderadamente alta y se suele encontrar en las coronas de las estrellas o en dispositivos típicos de la fusión por confinamiento magnético. Estos plasmas suelen ser ópticamente delgados con lo que la ecuación de transferencia radiativa se desacopla de las ecuaciones de tasa y por tanto ya hay una primera simplificación del problema. A diferencia de la situación de ELT, las ecuaciones en EC no pueden deducirse a partir de primeros principios sino que se obtienen a partir de las ecuaciones de tasas eliminando una gran cantidad de procesos cuyas tasas son despreciables a baja densidad quedando así un conjunto de ecuaciones muy simple. En cualquier

caso, hay que resaltar que tanto el ELT como el EC son situaciones particulares del modelo CR en situación estacionaria en los límites de alta y baja densidad, respectivamente, y por tanto el modelo CR proporciona los mismos resultados que esos modelos aproximados en dichas situaciones extremas.

## 2.3 Propiedades radiativas medias.

### 2.3.1 Ionización media.

Aunque la ionización media no es esencialmente una propiedad radiativa del plasma, dado su enorme importancia en este contexto se ha considerado necesario realizar una parametrización de la misma. Así, la ionización media es una magnitud fundamental tanto en la determinación de propiedades de transporte en plasmas, tales como las conductividades eléctricas y térmicas, como en la determinación de las propiedades radiativas del plasma.

Se supone un plasma homogéneo y en situación estacionaria, formado por iones, compuestos a su vez por núcleos de número atómico  $Z$  y electrones ligados (que ocupan estados cuánticos de energías negativas ligados a un ion), y electrones libres (caracterizados por estados de energía positiva). Se denota,  $n_{ion}$  a la densidad de iones (número de iones por unidad de volumen). Además, dependiendo del número de electrones perdidos, los iones pueden estar en diferentes estados de carga o de ionización. Sea entonces  $\zeta$  la carga del ion y  $N_\zeta$  la densidad de iones con carga  $\zeta$ . Lógicamente se cumplirá

$$\sum_{\zeta=0}^Z N_\zeta = n_{ion} \quad (2.15)$$

Además, en ausencia de haces de partículas externos, como cada ion de carga  $\zeta$  contribuye con  $\zeta$  electrones libres, la densidad de electrones libres,  $n_e$ , vendrá dada por

$$n_e = \sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_\zeta, \quad (2.16)$$

ecuación que representa la condición de neutralidad de carga.

El estado de carga promedio o ionización media,  $\bar{Z}$ , se define como

$$\bar{Z} = \frac{\sum_{\zeta=0}^Z \zeta N_\zeta}{\sum_{\zeta=0}^Z N_\zeta} = \frac{n_e}{n_{ion}} \quad (2.17)$$

Usando una expresión similar a (2.17), es posible calcular los momentos estadísticos de orden superior de la distribución de iones. Por ejemplo, el momento estadístico de orden dos se calcula como  $\overline{Z^2} = \left( \sum_{\zeta=0}^Z \zeta^2 N_\zeta \right) / n_{ion}$ . Esta expresión es útil para determinar la desviación estándar,

$$\sigma_Z = \left( \overline{Z^2} - \bar{Z}^2 \right)^{1/2}, \quad (2.18)$$

que nos da una idea de cuál es el intervalo de iones con densidad no nula que componen el plasma.

### 2.3.2 Opacidades medias de Rosseland y Planck.

Como se observa en la ecuación de transferencia radiativa (ver ecuación 2.2) las opacidades monocromáticas son funciones de la frecuencia del fotón. Esto hace que en las simulaciones hidrodinámicas para cada punto del plasma e instante de tiempo, se deban calcular en una malla de fotones, que puede ser muy amplia y fina, lo que implica una cantidad enorme de cálculo. Ello ha llevado a emplear promedios de las mismas. Los más comunes son la opacidad media de Planck y la opacidad media de Rosseland. La primera de ellas da cuenta de la absorción media que presenta un material a la radiación que incide sobre él. La segunda da cuenta de la difusión de la radiación a través del material. Las opacidades radiativas medias de Planck,  $k_P$ , y Rosseland,  $k_R$ , vienen dadas por [6]

$$k_P = \int_0^\infty d\nu \tilde{B}(\nu, T) \frac{\kappa(\nu)}{\rho} \quad (2.19)$$

$$\frac{1}{k_R} = \int_0^\infty d\nu \frac{\partial \tilde{B}(\nu, T)}{\partial T} \frac{\rho}{\kappa(\nu)}, \quad (2.20)$$

donde  $\rho$  es la densidad de materia del plasma y  $\tilde{B}(\nu, T)$  es la función Planckiana normalizada,

$$\tilde{B}(\nu, T) = \frac{15}{\pi^4 T} \frac{u^3}{e^u - 1}, \quad u = \frac{h\nu}{T}. \quad (2.21)$$

### 2.3.3 Pérdida de potencia por radiación.

La pérdida de potencia por radiación, o RPL por su acrónimo en inglés *radiative power loss*, es una magnitud fundamental ya que da cuenta de la energía que pierde el plasma por emisión de radiación. Así, por ejemplo, en dispositivos diseñados para la obtención de energía por fusión es fundamental su determinación porque en ocasiones resulta necesario conseguir que el plasma disipe más energía por radiación para mantener controlada la reacción o por contra que disipe menos energía porque de lo contrario no se produciría la reacción deseada. Además, en astrofísica su estudio es muy importante ya que en función de la dependencia formal del RPL con la temperatura y la densidad, se pueden predecir la aparición de ciertas inestabilidades hidrodinámicas en las ondas de choque típicas de muchos fenómenos estelares. El RPL está directamente relacionado con la emisividad del plasma y por tanto tiene contribuciones de transiciones tanto ligado-ligado, ligado-libre y libre-libre.

La contribución ligado-ligado viene dada por [7]

$$P_{bb} = \sum_{\zeta} \sum_{ij} h\nu_{ij} A_{ij} N_{\zeta j}. \quad (2.22)$$

La contribución ligado-libre está dada por:

$$P_{bf} = 4\pi \sum_{\zeta} \sum_{ij} N_{\zeta i} \left( \frac{N_{\zeta+1j} N_{\zeta}}{N_{\zeta i} N_{\zeta+1}} \right)^{ELT} \int_{\nu_0}^{\infty} \sigma_{\zeta i \rightarrow \zeta+1j}^{pho}(\nu) \left( \frac{2h\nu^3}{c^2} \right) e^{-h\nu/T_e} d\nu, \quad (2.23)$$

donde  $\nu_0$  es la energía umbral y el cociente de población en ELT es obtenido a partir de la ecuación de Saha.

La contribución de las emisiones libre-libre viene dada para un campo culombiano por

$$P_{ff} = 9.55 \times 10^{-14} n_e T_e^{1/2} \sum_{\zeta} Z_{\zeta}^2 N_{\zeta}, \quad (2.24)$$

El RPL total es obtenido entonces como la suma de esas tres contribuciones.



## 3 Ajuste de propiedades radiativas de plasma.

### 3.1 Introducción.

En este capítulo se presenta el paquete computacional desarrollado en este Trabajo de fin de Máster, denominado **PARPRA**, con la intención de lograr los objetivos presentados en el primer capítulo de esta Memoria y bajo las condiciones de plasmas descritas en el capítulo anterior. Como se comentó anteriormente, **PARPRA** fue programado en MATLAB y se integró en un entorno gráfico haciendo uso de GUIDE de MATLAB para facilitar y hacer más cómoda su utilización por el usuario. En los siguientes apartados se comentarán los distintos programas que constituyen este paquete computacional, aunque previamente se hará un comentario acerca de la generación de las bases de datos de propiedades radiativas empleando **ABAKO/RAPCAL**.

### 3.2 Generación de la base de datos de las propiedades radiativas.

El primer paso en un proceso de obtención de expresiones parametrizadas de propiedades radiativas es la generación de bases de datos de dichas magnitudes que serán objeto del posterior ajuste. Para ello se ha hecho uso del paquete computacional desarrollado en el seno de GIRMA denominado **ABAKO/RAPCAL** [8]. Este paquete computacional está constituido por dos códigos. **ABAKO** [9] que se creó para la obtención de las poblaciones de niveles atómicos de plasmas estacionarios de iones de  $Z$  tanto bajo como alto, homogéneos y no homogéneos, ópticamente gruesos y delgados, tanto en NELT como en ELT. En él se implementó un modelo colisional radiativo para estados estacionarios. En el desarrollo de este código se optó por un compromiso de exactitud y rapidez computacional tomando para ello expresiones analíticas para los procesos atómicos considerados en el modelo colisional. Además, debido al número tan elevado de niveles implicados en el sistema de ecuaciones de tasas a resolver y debido a la naturaleza de los procesos atómicos que conectan esos niveles, en **ABAKO** se emplean métodos de almacenamiento tipo *sparse* de los datos lo

que implica un ahorro sustancial de memoria. Una vez obtenidas las poblaciones iónicas estas son empleadas como entrada del código **RAPCAL** [10] que fue diseñado para el cálculo de propiedades radiativas de esos tipos de plasmas y entre ellas las que interesan en este Trabajo. **ABAKO/RAPCAL** ha sido ampliamente contrastado tanto con resultados experimentales como con simulaciones numéricas de códigos desarrollados en centros de investigación de reconocido prestigio en el área de la Física de Plasmas. Comparaciones y aplicaciones de este paquete computacional pueden encontrarse en [8–14].

La generación de una base de datos de magnitudes de plasma para diferentes condiciones de densidad y temperatura del mismo implica la elección de una cantidad mínima de datos, y por tanto de condiciones de plasma, que asegure ser suficiente como para lograr una parametrización adecuada, evitando así el cálculo innecesario de datos superfluos para la base. En este sentido, tanto la experiencia como las elecciones encontradas en la bibliografía llevó a elegir mallas de tipo logarítmicas, tanto para las densidades como para las temperaturas del plasma. Para los ajustes de elementos de número atómico bajo se ha encontrado que para la temperatura:

$$T_{i+1} = 10^{\Delta T}, \Delta T = 0.1, \quad (3.1)$$

y para la densidad, sea esta electrónica o de materia,

$$d_{i+1} = 10^{\Delta d}, \Delta d = 0.5, \quad (3.2)$$

estas mallas son óptimas. Como se observa, el paso en densidad es mayor que en temperatura ya que las propiedades radiativas tienen un comportamiento más variable con esta última variable que con la primera. Para los ajustes realizados hasta el momento de elementos de número atómico alto, como el xenón, no se ha podido concluir aún nada acerca de cuál es paso óptimo para la malla ya que los rangos de densidades y temperaturas ajustados no han sido muy amplios puesto que se han realizado para aplicaciones muy concretas.

La ejecución de **ABAKO/RAPCAL** se realizará para cada uno de los puntos de las mallas de densidades y temperaturas consideradas. En cada ejecución el código proporcionará tres ficheros, en donde se escribe la siguiente información, respectivamente:

- Poblaciones iónicas e ionización media.
- Opacidades medias de Rosseland y Planck.
- Pérdida de potencia por radiación (o *radiative power loss*, RPL).

Estos ficheros deberán guardarse siguiendo un formato fijo al generar la base de datos para así facilitar la posterior lectura por parte de **PARPRA**. Así, por cada elemento que se esté estudiando se generará una carpeta cuyo nombre será el símbolo químico del mismo. Dentro de ella encontraremos dos subcarpetas. Una de ellas, etiquetada con SAHA, en donde se almacenarán los cálculos realizados suponiendo al plasma en equilibrio local

termodinámico, esto es, resolviendo las ecuaciones de Saha-Boltzmann. La otra estará etiquetada con **CRSS**, para simulaciones realizadas resolviendo el modelo colisional radiativo implementado en **ABAKO**. Dentro de esas carpetas encontramos una estructura idéntica de nuevas carpetas. Estas corresponden con cada uno de los puntos de la malla de temperaturas consideradas y vienen etiquetadas como 'T01', 'T02',.... donde '01' denota el primer valor de la malla de temperatura y así sucesivamente. Dentro de cada carpeta de temperaturas encontramos por cada una de las densidades de la malla considerada, los tres ficheros, de extensión '.dat', citados anteriormente. En la figura 3.1 se ilustra la estructura para el caso en que se esté generando la base de datos del xenón, por ejemplo. El nombre de los ficheros generados consiste, en primer lugar, del símbolo químico del elemento que se esté considerando; a continuación, el caso de densidad con el que se corresponde ('01', '02',... con la misma interpretación que en el caso de la temperatura) y finalmente una etiqueta que identifique qué magnitud es la que se ha almacenado en el fichero. Por ejemplo, considerando el xenón, en el quinto punto de la malla de densidades se obtendrían los tres ficheros siguientes: 'Xe05ip.dat' (ionización media y poblaciones iónicas), 'Xe05rp.dat' (opacidades medias) y 'Xe05rpl.dat' (para el radiative power loss).

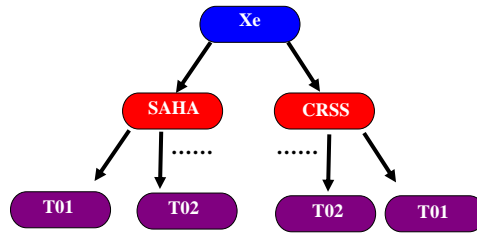


Figura 3.1.

*Estructura de carpetas de la base de datos.*

### 3.3 Descripción de **PARPRA**.

#### 3.3.1 Estructura de **PARPRA**.

**PARPRA** está estructurado en dos bloques. El primero de ellos, denominado **PRINCIPAL**, está compuesto de tres módulos: uno primero en el que, a partir de las bases de datos generadas con **ABAKO/RAPCAL** de las propiedades radiativas de plasmas monocomponentes, se generan los ficheros necesarios para realizar posteriormente la parametrización y que está constituido por el programa *creacion.m*. El segundo módulo es el encargado de la realización de la parametrización de las propiedades radiativas y es-

tá asociado al programa *fitsurface.m* y la función *ajuste.m*. Finalmente, el tercer bloque está dedicado a la evaluación de las propiedades radiativas parametrizadas en cualquier condición de plasma que se desee y/o su representación gráfica en función de la densidad y/o de la temperatura, esto es, representaciones tri- y bidimensionales. Este último bloque está conformado por los programas *evaluacion.m* y *representacion.m*. En la figura 3.2 se presenta el diagrama de flujo de **PRINCIPAL**.

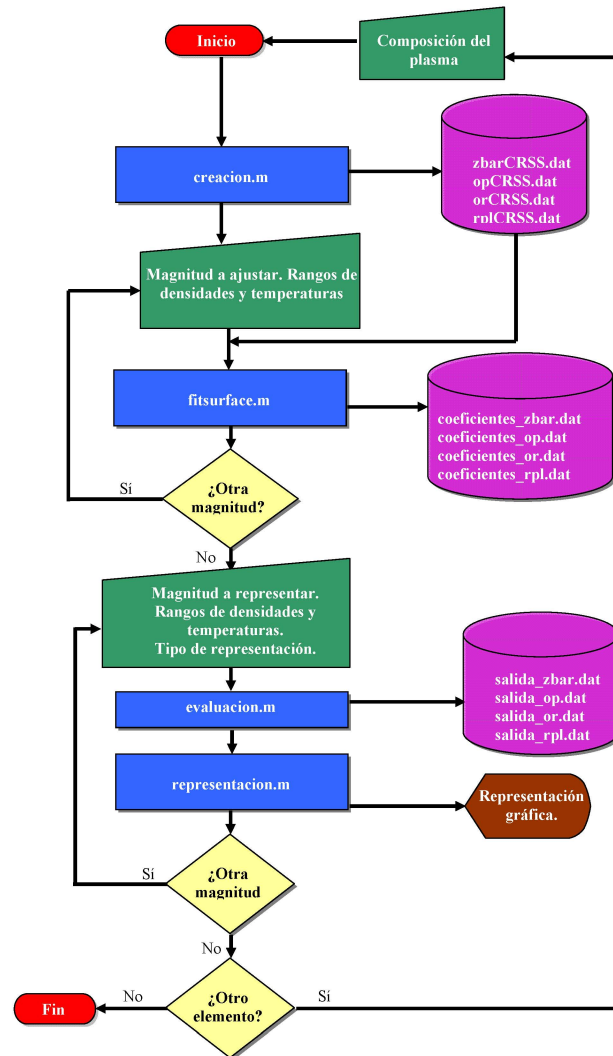


Figura 3.2.

Diagrama de flujo de **PRINCIPAL**.

El segundo bloque de **PARPRA**, denominado **APLICACION**, hace uso de la parametrización realizada en **PRINCIPAL** para tres aplicaciones en particular: simulación de plasmas formados por dos componentes (mezclas binarias), elaboración de mapas termodi-

námicos, que consta del programa *mapas.m*, y diagnóstico de temperatura en experimentos de Astrofísica de laboratorio, constituida por el programa *diagnosis.m*. El diagrama de flujo de **APLICACION** se presenta en la figura 3.3. A continuación se pasará a comentar cada uno de los programas que componen ambos bloques.

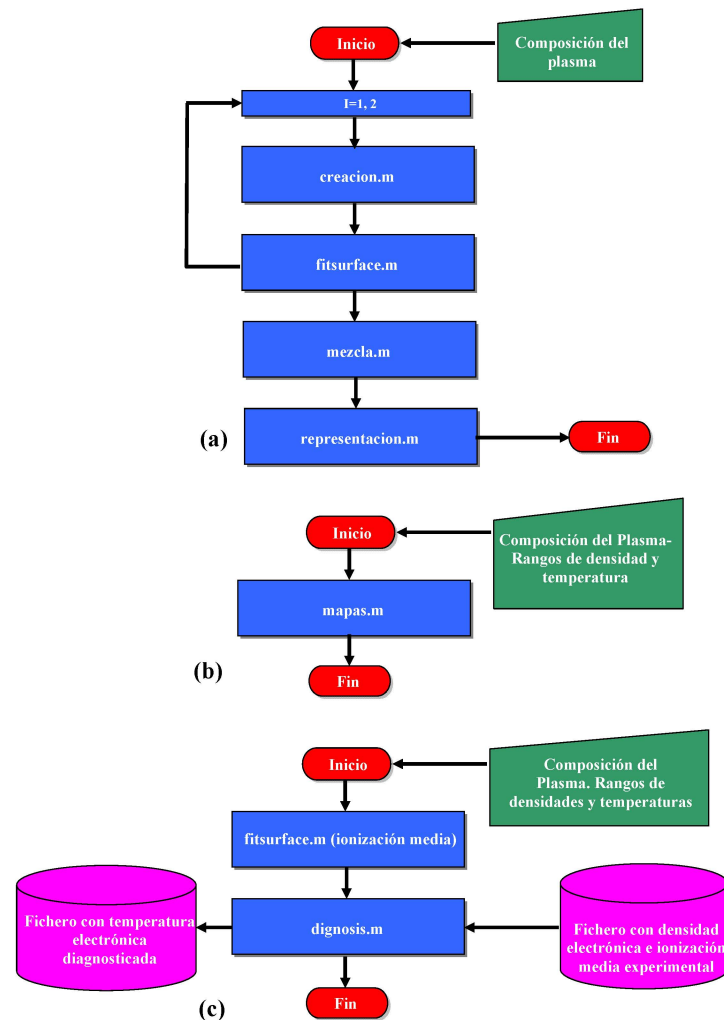


Figura 3.3.

Diagrama de flujo de **APLICACIÓN**. (a) Módulo de mezclas binarias. (b) Módulo de determinación de mapa termodinámico. (c) Módulo de diagnóstico de temperatura.

### 3.3.2 Módulo para la generación de ficheros de entrada a partir de las bases de datos.

De acuerdo a lo comentado anteriormente y tal y como se observa en el diagrama de flujo de **PRINCIPAL** (ver figura 3.2) este módulo está compuesto por el programa *creacion.m*. Este programa está diseñado para acceder a los diferentes ficheros que componen la bases de datos de cada una de las propiedades radiativas generados por **ABAKO/RAPCAL** con el fin de generar las matrices de la magnitud a ajustar en el formato escogido para la realización de la parametrización. En la primera fila de la matriz se escribirán las densidades y en la primera columna las temperaturas, siendo el elemento (1,1) un cero. En el resto de filas y columnas se escriben los valores de la propiedad radiativa objeto del ajuste. A continuación se adjuntan las líneas del código que se emplean para ello.

```
%*****
%Construcción del nombre de los directorios en donde va a buscar los
%ficheros
%*****
%Bucle en temperaturas
for i=2:nt+1
    dir_nlte=strcat(dir,'\CRSS\T', num2str(i-1, '%02d'));
    dir_lte=strcat(dir,'\SAHA\T', num2str(i-1, '%02d'));
    for j=2:nd+1 %Bucles en casos de densidad dentro de los casos de temperatura
        %Construcción del nombre de los ficheros
        file1a=strcat(elemento, num2str(j-1, '%02d'), 'ip.sah'); %Pob. iónicas
        file1b=strcat(elemento, num2str(j-1, '%02d'), 'ip.m3r'); %Pob. iónicas
        file2=strcat(elemento, num2str(j-1, '%02d'), 'rp.dat'); %Opacidades medias y Zbar
        file3=strcat(elemento, num2str(j-1, '%02d'), 'rpl.dat'); %Radiative power loss
        file_lte1=strcat(dir_lte, '\', file1a);
        file_lte2=strcat(dir_lte, '\', file2);
        file_lte3=strcat(dir_lte, '\', file3);
        file_nlte1=strcat(dir_nlte, '\', file1b);
        file_nlte2=strcat(dir_nlte, '\', file2);
        file_nlte3=strcat(dir_nlte, '\', file3);
    end
end
%*****
%*****Construcción de las matrices*****
%Construcción de la matriz de zbar
al=importdata(file_lte1, ' ', 3);
bl=al.colheaders(3);
zbarl(i,j)=str2double(bl);
an=importdata(file_nlte1, ' ', 3);
bn=an.colheaders(3);
```

```

        zbarn(i,j)=str2double(bn);
%Construcción de la matriz de opacidades medias de Planck y Rosseland.
        al=importdata(file_lte2,' ',2);
        opl(i,j)=al.data(end,1);
        orl(i,j)=al.data(end,2);
        an=importdata(file_nlte2,' ',2);
        opn(i,j)=an.data(end,1);
        orn(i,j)=an.data(end,2);
%Construcción de la matriz de RPL
        al=importdata(file_lte3,' ',16);
        rpll(i,j)=al.data(end,4);
        an=importdata(file_nlte3,' ',16);
        rpln(i,j)=an.data(end,4);
    end
end

```

Con este programa se generarían las matrices de las cuatro propiedades radiativas de interés tanto si han sido calculadas a través de las ecuaciones de Saha-Boltzmann (esto es, asumiendo ELT) o con el modelo CR. Las matrices generadas son guardadas en ficheros de extensión '.dat' tal y como se puede observar en la figura 3.2.

### 3.3.3 Módulo para la parametrización de las propiedades radiativas.

Una vez ya se tienen en el formato adecuado las magnitudes a parametrizar se procede al ajuste de las mismas en función de la densidad y de la temperatura. Se ha comprobado que, debido a la naturaleza de las magnitudes a ajustar, resulta más conveniente realizar la parametrización del logaritmo (en base diez) de la magnitud que de la magnitud en sí. Por tanto, si  $A$  denota la magnitud a ajustar, la expresión analítica empleada para el ajuste es

$$\log A(T, d) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m C_{ij} (\log d)^i (\log T)^j. \quad (3.3)$$

Se ha comprobado que, con el fin de no obtener comportamientos oscilantes en los polinomios de ajuste, la potencia máxima, tanto para la densidad como para la temperatura no debe exceder de siete. El método empleado para la determinación de los coeficientes es el habitual de mínimos cuadrados que consiste en ajustar los puntos a una recta y exigir que la suma de los cuadrados de los residuos entre la  $y$  medida y la  $y$  calculada con el modelo lineal sea mínima:

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_{i,medida} - y_{i,modelo})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_1)^2. \quad (3.4)$$

Los coeficientes  $a_0$  y  $a_1$  se determinan mediante minimización:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_r}{\partial a_0} &= -2 \sum (y_i - a_0 - a_1 x_i) = 0 \\ \frac{\partial S_r}{\partial a_1} &= -2 \sum [(y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i] = 0,\end{aligned}\tag{3.5}$$

$$\text{resultando: } a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x} \text{ y } a_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}.$$

Esto se puede extender al caso donde  $y$  es una función lineal de dos variables independientes:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2,$$

donde, de nuevo, los valores de los coeficientes se determinan al sumar los cuadrados de los residuos:

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_{1i} - a_2 x_{2i})^2,\tag{3.6}$$

y diferenciando:

$$\begin{aligned}\frac{\partial S_r}{\partial a_0} &= -2 \sum (y_i - a_0 - a_1 x_{1i} - a_2 x_{2i}) = 0 \\ \frac{\partial S_r}{\partial a_1} &= -2 \sum [(y_i - a_0 - a_1 x_{1i} - a_2 x_{2i}) x_{1i}] = 0 \\ \frac{\partial S_r}{\partial a_2} &= -2 \sum [(y_i - a_0 - a_1 x_{1i} - a_2 x_{2i}) x_{2i}] = 0,\end{aligned}\tag{3.7}$$

lo que puede expresarse en forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_{1i} & \sum x_{2i} \\ \sum x_{1i} & \sum x_{1i}^2 & \sum x_{1i} x_{2i} \\ \sum x_{2i} & \sum x_{1i} x_{2i} & \sum x_{2i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1i} y_i \\ \sum x_{2i} y_i \end{bmatrix}$$

Debido a la dependencia de las propiedades radiativas con la densidad y la temperatura y al amplio rango de condiciones de densidad y temperatura a considerar, resulta imposible realizar la parametrización con un único polinomio. Además, el número de polinomios requerido para la parametrización también aumentará a medida que el error relativo entre el ajuste y los datos se haga más restrictivo. En particular, se ha exigido en este trabajo un error menor del 1% para la ionización media y entre 5-10% para las demás, errores comúnmente aceptables para las propiedades radiativas. En la figura 3.4 se muestra, como ejemplo, la parametrización de la pérdida de potencia por radiación dividida por la densidad electrónica y la densidad iónica (magnitud llamada *cooling rate*), para un rango amplio de temperaturas y varias densidades, para un plasma de carbono. De la figura se desprende que el ajuste presenta un acuerdo excelente con la curva correspondiente a la base de datos. En el Cuadro 3.1 presentamos el número de cuadrantes obtenidos en el procedimiento de ajuste de la Figura 3.4, el error medio cometido en cada cuadrante entre la magnitud



ajustada y valores de la magnitud calculados con **ABAKO** tanto los empleados en el ajuste (esto es, de la base de datos) como aquellos fuera de la base de datos. De la tabla se observa la bondad del ajuste propuesto puesto que los errores medios por cuadrante son también más pequeños del 10 %. Evidentemente, si se hace más restrictivo el error en el ajuste, estas diferencias se verían también mejoradas pero se reproduciría un consecuente aumento del número de cuadrantes, y por tanto de polinomios, que en ocasiones no resulta ventajoso.

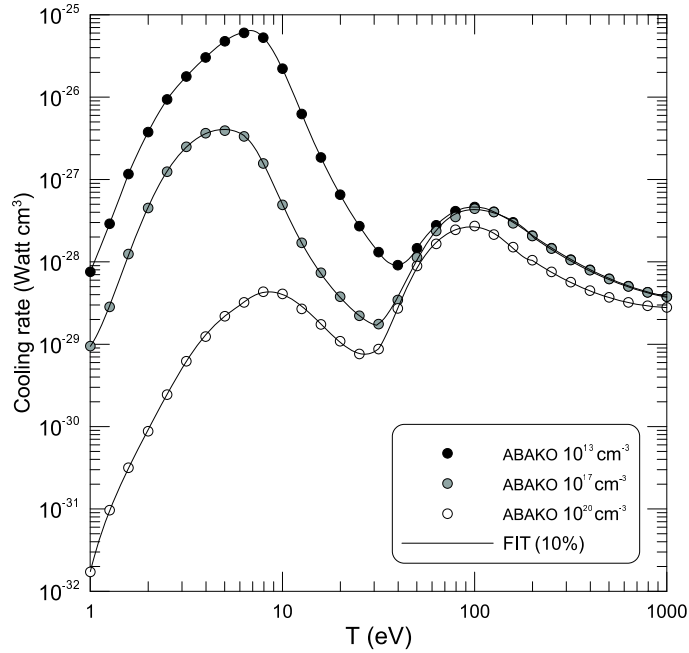


Figura 3.4.

*Ajuste de la pérdida de potencia por radiación dividida por la densidad electrónica y la densidad iónica (cooling rate) imponiendo un error máximo del 10 %.*

Para la división de forma óptima de la mallas de densidad y temperatura y por tanto de la búsqueda de los polinomios que parametricen la propiedad radiativa se ha hecho uso de un método QuadTree. Este término se utiliza para describir clases de estructuras de datos jerárquicas cuya propiedad común es que están basados en el principio de descomposición recursiva del espacio de búsqueda. En el caso que ocupa este trabajo se parte del espacio de búsqueda bidimensional de densidades y temperaturas del plasma, donde para cada condición de densidad y temperatura tenemos un único valor de la propiedad radiativa

Cuadro 3.1. Error medio (en %) en cada cuadrante entre los valores del ajuste y los de la magnitud a ajustar, imponiendo un error del 10 % como máximo. Se presentan los errores tanto para puntos incluidos en el ajuste, esto es, en la base de datos ajustados, como en puntos no incluidos.

Cuadrante	Valores base datos (%)	Valores fuera de la base de datos (%)
1	1.93	2.41
2	2.45	3.05
3	3.64	3.65
4	1.46	2.16
5	4.12	4.01
6	1.24	2.40
7	3.34	3.71
8	3.4	4.52
9	2.18	2.38
10	2.54	3.68

objeto de la parametrización. Inicialmente, por tanto, se parte del espacio completo y se intenta encontrar un único polinomio que ajuste todos los valores del espacio verificando el criterio impuesto. Si no se cumple, se divide el espacio de búsqueda en cuatro rectángulos iguales. A continuación, se busca en cada cuadrante un polinomio que ajuste a la magnitud en todos los puntos del cuadrante. Si se logra, ese cuadrante ya no se vuelve a dividir. De lo contrario se seguirá dividiendo. En la figura 3.5 se representa un ejemplo. En él se observa que en los cuadrantes etiquetados como 23 y 24 no se ha logrado el ajuste deseado, con lo que se dividen otra vez en cuatro. Posteriormente se observa cómo los cuadrantes 332 y 343 vuelven a sufrir una división y así sucesivamente hasta que se haya logrado la parametrización de la magnitud en todo el espacio de búsqueda. De la figura queda claro que el QuadTree presenta una estructura de tipo árbol y, como se comentó anteriormente, jerarquizada. Finalmente la parametrización estará constituida por tantos polinomios como cuadrantes hayamos obtenido en nuestro proceso de división del espacio de búsqueda.

### 3.3.4 Módulo de representación gráfica.

Este módulo está constituido por dos programas, tal y como se observa en la figura 3.2. El primero de ellos, *evaluacion.m*, se encarga de evaluar la propiedad radiativa parametrizada, haciendo uso de los polinomios obtenidos con tal fin, en los puntos de densidad y temperatura que desee el usuario y que no tienen por qué coincidir con los puntos de las mallas empleados para la parametrización. A este programa se le debe introducir además, la magnitud a evaluar. Con todo ello, realiza una búsqueda del polinomio adecuado para el

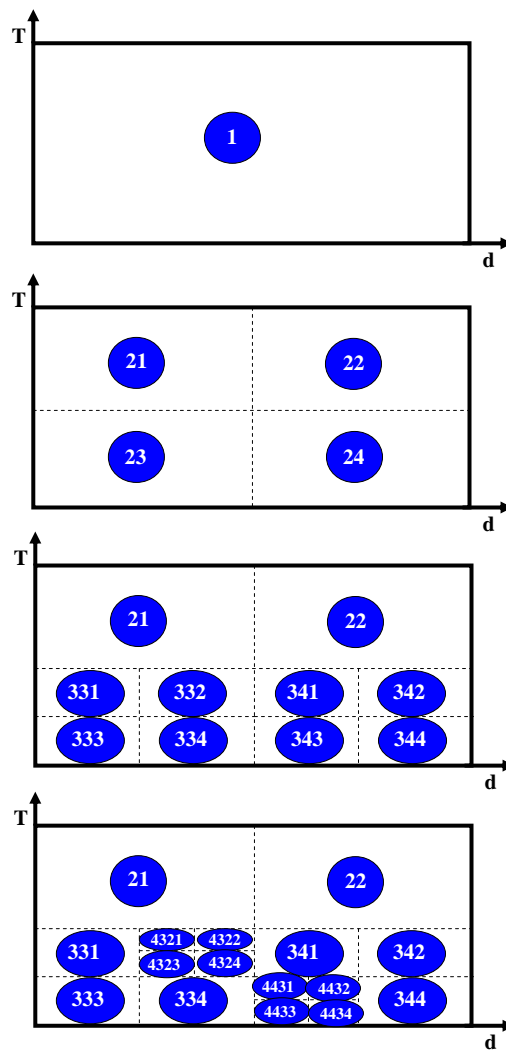


Figura 3.5.

*Ejemplo de división del espacio de búsqueda de densidades y temperaturas siguiendo un método QuadTree.*

cálculo de la magnitud en cada uno de los puntos de densidad y temperatura que se hayan seleccionado. A continuación se presentan las líneas del código encargadas de ello.

```
%Aquí deben aparecer el conjunto de valores de densidad y temperatura en
%las que se quiere evaluar el ajuste
x=log10(x);
y=log10(y);
res=[];
cuenta=0;
```

```

%for contador=1:fila
    for k=1:length(x) %recorremos las densidades
        ep1=0;
        ep2=0;
        for l=1:length(y) %recorremos las temperaturas
            for contador=1:fila
                if(k==length(x))
                    ep1=1e-6;
                end
                if(l==length(y))
                    ep2=1e-6;
                end
                if((x(k)>=rr(contador,1))&&(x(k)<rr(contador,2)+ep1))
                    if ((y(l)>=rr(contador,3))&&(y(l)<rr(contador,4)+ep2))
                        cont=7;
                        sumap=0;
                        cuenta=cuenta+1;
                        for i=1:r(contador,5)+1 %orden de densidad
                            for j=1:r(contador,6)+1 %orden de temperatura
                                sumap=sumap+r(contador,cont)*(x(k)^(i-1))*(y(l)^(j-1));
                                cont=cont+1;
                            end
                        end
                        res(cuenta,1:3)=[10.^x(k) 10.^y(l) 10.^sumap];
                    end
                end
            end
        end
    end
end
end
%*****

```

El segundo programa que constituye este módulo es *dibuja.m*. Este, a partir de los ficheros que se generan en evaluación, se encargará de representar gráficamente los valores de la propiedad radiativa parametrizada. Como entrada requiere el elemento químico bajo estudio, el rango de densidades y de temperaturas a representar gráficamente, la magnitud física a representar y la opción de representación. En la primera parte del programa a partir de esa información se construye el nombre del fichero de entrada que se va a representar.

```

dir=strcat('BasesDatos\',elemento);
dir_salida_CRSS=strcat(dir,'\CRSS');
%****Elección de la magnitud a representar*****

```

```

switch magnitud
    case 'zbar'
        fichero1=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'coeficientes_zbar.dat');
        fichero2=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'ajuste_zbar.dat');
        r=importdata(fichero1,' ',0);
        r2=importdata(fichero2,' ',0);

    case 'op_planck'
        fichero=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'coeficientes_op.dat');
        fichero2=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'ajuste_op.dat');
        r=importdata(fichero,' ',0);
        r2=importdata(fichero2,' ',0);

    case 'op_Rosseland';
        fichero=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'coeficientes_or.dat');
        fichero2=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'ajuste_or.dat');
        r=importdata(fichero,' ',0);
        r2=importdata(fichero2,' ',0);

    case 'RPL'
        fichero=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'coeficientes_rpl.dat');
        fichero2=strcat(dir_salida_CRSS, '\', 'ajuste_rpl.dat');
        r=importdata(fichero,' ',0);
        r2=importdata(fichero2,' ',0);
end
d=r2(1,2:end);t=r2(2:end,1);r3=r2(2:end,2:end);
%*****

```

A continuación, se generará la representación deseada. El programa presenta cuatro opciones: representación 3D de la propiedad en términos de la densidad y de la temperatura, una proyección bidimensional de la representación 3D, representación bidimensional de la magnitud en función de la densidad para varias temperaturas y representación bidimensional de la magnitud en función de la temperatura para varias densidades. Además de la representación gráfica se realiza una gestión de las leyendas y títulos que aparecerán en la representación gráfica y que variarán dependiendo de la opción elegida. A continuación se muestran las líneas del código encargadas de ello.

```

%Representación gráfica
switch opcion_dibujo

```

```

    case '3D'

```

```

figure;
surf(log10(d),log10(t),r3);
colormap(hsv(128));
colorbar;
xlabel(etiquetax);
ylabel('log(Temperatura (eV))');
zlabel(etiquetaz);
axis tight
title(titulo3d);

case '2D'
figure;
surf(log10(d),log10(t),r3);view(2);shading interp;
colorbar;
xlabel(etiquetax);
ylabel('log(Temperatura (eV))');
axis tight
title(titulo2d);

case 'vsdensidad'
figure;
x=d;
y=[NewVal1 NewVal2 NewVal3];
[r4]=evaluacion(magnitud,x,y,elemento);
switch magnitud
    case 'zbar'
        plot(log10(x),r4(2,2:end),'r',log10(x),r4(3,2:end),
            'b',log10(x),r4(4,2:end),'k');
        case {'op_planck','op_Rosseland','RPL'}
            plot(log10(x),log10(r4(2,2:end)),'r',log10(x),log10(r4(3,2:end)),
                'b',log10(x),log10(r4(4,2:end)),'k');
    end
xlabel(etiquetax);
ylabel(etiquetaz);
axis tight
title(titulovsd);
leyenda1=strcat('T=',num2str(y(1), '%9.2f'),'eV');
leyenda2=strcat('T=',num2str(y(2), '%9.2f'),'eV');
leyenda3=strcat('T=',num2str(y(3), '%9.2f'),'eV');
legend(leyenda1,leyenda2,leyenda3);

```

```

case 'vstemperatura'
    figure;
    x=[NewVald1 NewVald2 NewVald3];
    y=t;
    [r4]=evaluacion(magnitud,x,y,elemento);
    switch magnitud
        case 'zbar'
            plot(log10(x),r4(2,2:end),'r',log10(x),r4(3,2:end),
                'b',log10(x),r4(4,2:end),'k');
        case {'op_planck','op_Rosseland','RPL'}
            plot(log10(x),log10(r4(2,2:end)),'r',log10(x),log10(r4(3,2:end)),
                'b',log10(x),log10(r4(4,2:end)),'k');
    end
    xlabel('log(Temperatura(eV))');
    ylabel(etiquetaz);
    axis tight
    title(titulovst);
    switch selec_dens
        case 'M'
            leyenda1=strcat('\rho=',num2str(x(1), '%7.2e'),'gcm^{-3}');
            leyenda2=strcat('\rho=',num2str(x(2), '%7.2e'),'gcm^{-3}');
            leyenda3=strcat('\rho=',num2str(x(3), '%7.2e'),'gcm^{-3}');
        case 'N'
            leyenda1=strcat('Ne=',num2str(x(1), '%7.2e'),'cm^{-3}');
            leyenda2=strcat('Ne=',num2str(x(2), '%7.2e'),'cm^{-3}');
            leyenda3=strcat('Ne=',num2str(x(3), '%7.2e'),'cm^{-3}');
    end
    legend(leyenda1,leyenda2,leyenda3);
end

```

## 3.4 Aplicaciones.

### 3.4.1 Módulo para la simulación de mezclas binarias.

Los plasmas constituidos por mezclas de dos elementos son muy comunes en todos los ámbitos de los plasmas. Así tenemos mezclas de este tipo en Astrofísica, en los dispositivos de fusión magnética al introducir en el plasma impurezas de otro elemento para poder así controlar la pérdida de potencia por radiación y en fusión inercial en los *holhraums*, pequeños cilindros en general de oro en donde se introduce el blanco en el que se quiere crear

el plasma por la incidencia indirecta de radiación. Ese oro se dopa con gadolinio en muchas ocasiones para aumentar la opacidad media de Rosseland del oro puro en ciertas regiones espectrales. La parametrización de las propiedades radiativas de plasmas bicomponentes es una aplicación directa de la parametrización de los plasmas monocomponentes. Esto es, a partir de los ficheros con los polinomios de ajuste de las propiedades radiativas de los dos elementos de la mezcla obtenidos de forma independiente, se puede obtener el valor de la propiedad de la mezcla a partir de la evaluación de la misma en cada elemento y la posterior suma de ambos valores pesados con la correspondiente fracción molar. Queda claro, por tanto, que únicamente se podrán abordar mezclas binarias con elementos cuyas propiedades radiativas han sido previamente parametrizadas. El programa desarrollado para el estudio de las mezclas binarias es muy similar a *evaluacion.m* ya que simplemente es una extensión del mismo a dos componentes.

### 3.4.2 Módulo de creación de mapas termodinámicos.

Como se comentó en el segundo capítulo, la resolución de las ecuaciones de tasa en un modelo CR, en ocasiones, debido al número de niveles a incluir, resulta muy complejo y computacionalmente exige un consumo de tiempo muy elevado. Sin embargo, como también se comentó, hay ciertas condiciones de densidad y temperatura en las que el plasma se puede asumir en ELT y las poblaciones se pueden obtener a partir de la resolución de las mucho más simples ecuaciones de Saha-Boltzmann. Por tanto, resulta muy útil disponer de una herramienta que proporcione información acerca del estado termodinámico del plasma, esto es en ELT o en NELT, para así optar por un método u otro de cálculo de las poblaciones, y esta herramienta es precisamente el mapa termodinámico. En la literatura hay disponibles algunos criterios cualitativos que permiten estimar si un ion puede considerarse o no en ELT [5]. Sin embargo, el criterio aquí empleado permite establecer el régimen termodinámico del plasma como un todo, esto es de todos los iones presentes en una determinada condición de densidad y temperatura: cuando las poblaciones iónicas,  $p_i$ , calculadas a partir de las ecuaciones de Saha-Boltzmann,  $p_i^{SB}$ , presentan una desviación media ( $\Delta p$ ) con respecto a aquellas obtenidas a partir del modelo CR,  $p_i^{CR}$ , menor que un cierto valor impuesto ( $\Delta p^*$ ) entonces se puede considerar que el plasma ha alcanzado el régimen de ELT. En otro caso, el plasma está en NELT. La desviación media se calcula como:

$$\Delta p^{LTE} = \sqrt{\frac{\sum_i (p_i^{CRSS} - p_i^{SB})^2}{\sum_i (p_i^{SB})^2}} \leq \Delta p^*, \quad (3.8)$$

donde  $i$  corre sobre el conjunto completo de iones incluidos en el cálculo. En trabajos previos [6, 15, 16] se obtuvo que el valor del criterio  $\Delta p^*$  igual a 0.1 (= 10 %) lleva a resultados que concuerdan con los otros criterios por iones o niveles de la literatura y que son muy empleados.

El programa desarrollado para la obtención del mapa termodinámico se denomina *mapas.m*, como se puede observar en la figura 3.3. En la primera parte del programa se realiza



la búsqueda y recopilación en la base de datos del elemento bajo análisis de las poblaciones iónicas, calculadas tanto con el modelo CR y con las ecuaciones de Saha, para todos los casos de densidad y temperatura que desee el usuario y simultáneamente se va aplicando el criterio para cada condición de plasma leída de fichero.

```
%Carga de ficheros
global elemento selec_dens
dir=strcat('BasesDatos\',elemento);
fichero=strcat(dir, '\', 'mallas.dat');
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Definición de variables
pobl_new=zeros(92);
pobn_new=zeros(92);
aa=importdata(fichero,' ',0);
nt=aa(1,1);
nd=aa(2,1);
temperaturas=aa(1,2:nt+1);
densidades=aa(2,2:nd+1);
map=zeros(nt,nd,5);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%Diferencia de poblaciones iónicas.
contador=1;
for i=1:nt %Bucles en casos de temperatura
    dir_nlte=strcat(dir,'\CRSS\T', num2str(i, '%02d'));
    dir_lte=strcat(dir,'\SAHA\T', num2str(i, '%02d'));
    fpi=0;
    for j=1:nd %Bucles en densidad dentro casos de temperatura
        %Construcción del nombre de los ficheros
        file1a=strcat(elemento, num2str(j, '%02d'), 'ip.sah');
        file1b=strcat(elemento, num2str(j, '%02d'), 'ip.m3r');
        filea=strcat(dir_lte, '\', file1a);
        fileb=strcat(dir_nlte, '\', file1b);
        popl=importdata(filea, ' ', 3);
        popn=importdata(fileb, ' ', 3);
        pobl=popl.data(:,2);
        numl=popl.data(:,3);
        pobn=popn.data(:,2);
        numn=popn.data(:,3);
        for k=1:size(pobl,1)
            pobl_new(numl(k)+1)=pobl(k);
        end
    end
end
```

```

        for k=1:size(pobn,1)
            pobn_new(numn(k)+1)=pobn(k);
        end
        %Criterio en poblaciones iónicas
        den=sum(pobl_new.^2);
        num=(sum((pobl_new-pobn_new).^2)).^0.5;
        cp=100*(num/den);
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
        %Generación de mapa en poblaciones iónicas
        if (cp<=10)%&&(fpi==0)
            map(i,j,1)=2;
        else
            map(i,j,1)=1;
            fpi=1;
        end

        contador=contador+1;
    end
end

Una vez el mapa se ha obtenido con la aplicación, el siguiente punto es la representación gráfica del mismo. Se realiza un dibujo bidimensional en donde en función de la densidad y de la temperatura tendremos dos posibles colores, uno para cada posible régimen termodinámico.

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%Representación gráfica de los mapas
switch selec_dens
    case 'M'
        etiquetax=' log(Densidad de materia (g/cm^3))';

    case 'N'
        etiquetax=' log(Densidad de electrones (cm^{-3}))';
    end

figure;
surf(log10(densidades'),log10(temperaturas),map(:,:,1));view(2);shading flat;

xlabel(etiquetax);
ylabel('log(Temperatura (eV))');

```

```

axis tight
a='Mapa termodinámico del  ';
b=elemento;
titulo=[a,b];
title(titulo);
annotation('textbox', [.81 .14 .07 .06 ],'Color',[1 1 1],'EdgeColor',[1 1 1],
'String', 'LTE');
annotation('textbox', [.16 .835 .075 .06 ],'Color',[1 1 1],'EdgeColor',[1 1 1],
'String', 'NLTE');

```

### 3.4.3 Módulo de diagnosis de temperatura en experimentos de plasmas astrofísicos reproducidos en laboratorio.

La popularidad del campo de la Astrofísica de laboratorio ha crecido considerablemente en las dos últimas décadas. Dos desarrollos en el campo han contribuido al desarrollo satisfactorio de modelos astrofísicos de laboratorio: el primero, que se ha demostrado que la hidrodinámica pueden ser escalada correctamente entre escenarios astrofísicos y de laboratorio [17]; el segundo, la mejora de los sistemas láseres ultrapotentes, lo que permite generar en el laboratorio plasmas que se encuentran en regímenes propios de ciertos escenarios astrofísicos. Estos experimentos permiten explicar y predecir lo que ocurre en los fenómenos astrofísicos y tienen, además, la ventaja de ser repetibles y que las condiciones iniciales están bajo control. Además, esos experimentos proporcionan también datos importantes para la validación y la verificación de diversos aspectos de códigos numéricos tales como la física atómica, la ecuación de estado, la transferencia radiativa y la hidrodinámica.

Desde 2010 el grupo de investigación GIRMA del Departamento de Física de la ULPGC viene colaborando con un grupo experimental conformado por miembros del Imperial College de Londres y del Appleton Rutherford Laboratory de Oxford. Fruto de esta colaboración han sido diversos artículos publicados conjuntamente en revistas de prestigio en el área [6, 18–20] y la participación conjunta en un experimento de 5 semanas de duración que se realizará este mes de septiembre en las instalaciones del Appleton Rutherford Laboratory haciendo uso de los láseres ultrapotentes GEMINI y JUPITER. El objetivo fundamental de dicho experimento es reproducir y estudiar en laboratorio ondas de choque (ondas que se propagan por un medio a una velocidad mayor que la del sonido en dicho medio) que pierden energía al emitir radiación. Estas son uno de los fenómenos astrofísicos más interesantes y comunes y además juegan un papel transcendental en el transporte de energía en el medio interestelar. En estos experimentos se hace incidir un láser ultrapotente en un gas constituido por *clusters* atómicos, esto es grupos de átomos unidos entre ellos por fuerzas interatómicas, los cuales poseen una muy alta absorción de la radiación generando así una onda de choque cilíndrica que se propagará posteriormente por el medio. Para lograr que la onda de choque emita radiación, los gases comúnmente empleados para su generación están constituidos por elementos de número atómico medio, en general xenón

y kriptón, ya que son más eficaces radiando energía. En dichos experimentos, la densidad electrónica y la de materia del medio son datos medibles, pero no así la temperatura, que queda como parámetro a determinar. La diagnosis de la temperatura es fundamental y es precisamente en este aspecto en donde GIRMA colabora, en su determinación gracias al modelo CR implementado en **ABAKO** y a la parametrización de la ionización media.

El procedimiento para ello es el siguiente (un esquema puede verse en la figura 3.3). En el rango de densidades experimental y para un rango de temperaturas en el que cree que el experimento se desarrolla (este rango está delimitado por la potencia del láser) se genera la base de datos de ionización media del elemento tal y como se ha comentado con anterioridad. A continuación se parametriza imponiendo un error muy restrictivo (del 0.1 %) ya que se está interesado en obtener la mayor exactitud en la diagnosis de la temperatura. Por otra parte, para diferentes instantes de tiempo del experimento se dispone de las medidas experimentales de densidad electrónica y de la ionización media con resolución espacial, esto es para cada punto de la onda de choque. En la figura 3.6 se muestra un ejemplo de perfil de densidad electrónica experimental para diferentes instantes de tiempo y para todos los puntos de una onda de choque radiante. El proceso es la búsqueda de la temperatura, para cada densidad electrónica experimental, que proporcione en la magnitud parametrizada un valor que se asemeje (con una diferencia relativa menor del 0.1 %) al correspondiente valor experimental, con lo cual se habrá determinado la temperatura de ese punto para ese instante de tiempo. Por otra parte, las ondas de choque radiativas son

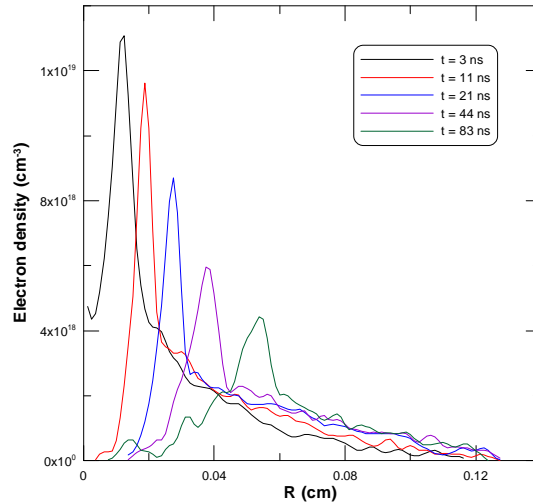


Figura 3.6.

*Perfil de densidad electrónica experimental de una onda de choque radiante para diferentes instantes de tiempo.*

susceptibles de sufrir inestabilidades hidrodinámicas en el frente de la onda, en particular

la inestabilidad por enfriamiento térmico es característica de ellas. Estas están causadas por el constante frenado y aceleración de la velocidad del frente de la onda debido a la pérdida de energía por radiación y a la posterior recuperación de la misma al pasar por puntos del medio que se encuentran ionizados por dicha radiación, y son muy importantes porque pueden ser la semilla de fenómenos turbulentos. La aparición de estas inestabilidades puede predecirse teóricamente a partir del análisis funcional de una de las propiedades radiativas bajo análisis en este trabajo: la pérdida de potencia por radiación (*radiative power loss*, RPL). Mediante un ajuste local a una ley de potencias en temperatura y densidad de esta magnitud y el posterior análisis de los exponentes de ese ajuste se puede concluir si para unas condiciones de densidad del plasma se presentará o no ese tipo de inestabilidad. Gracias al ajuste del RPL realizado con *fitsurface.m* de plasmas de xenón y kriptón se ha podido establecer en qué situaciones experimentales esas inestabilidades son posibles (ver [20]) concordando los resultados con lo observado experimentalmente.

El código encargado de hacer la diagnosis de la temperatura es el llamado *diagnosis.m* (ver figura 3.3) y tiene la forma siguiente:

```
global file02 elemento datos

%Cargamos el fichero de coeficientes correspondiente a la magnitud deseada
dir1=strcat('BasesDatos\',elemento);
dir2=strcat(dir1,'\CRSS');
fichero1=strcat(dir2, '\', 'resultado.dat');
resultado=importdata(fichero1,' ',0);
r=resultado;

%Cargamos el fichero de ionización media experimental:
importardatos=importdata(file02,' ',0);
dens=importardatos(:,2);
zbarexp=importardatos(:,3);
c=importardatos(:,1);

ecri=0.1; %error de criterio con el que queremos calcular la Temperatura
itermax=30; %Se fija el número de iteraciones máximas.
for n=1:length(dens)
    x=dens(n); %densidades.
    Ti=0.7389; %límite inferior de la Temperatura.
    Tf=33; %límite superior de la Temperatura.
    error=2*ecri;
    p=1;
    valor=0;
```

```
if zbarexp(n)>10
    valor=2;
else
    while error > escri

        if p>itermax    %fijamos unas condiciones para conocer los
                        %orígenes del aborto de la búsqueda:
                        %puede pasar que el n° de iteraciones sea demasiado
                        %alto o que el valor de la ionización media sea
                        %mayor que 10 (no podemos calcular la temperatura
                        %en estas condiciones). Con "valor" sabremos si
                        %sucede alguna de estas condiciones .

        valor=1;
        break
    end

    y=abs(Ti+Tf)/2;      %y=Tpropuesta

    zbar=evaluacion(x,y,r);
    error=(abs(zbar-zbarexp(n))/zbarexp(n))*100;    %cálculo del error

    if zbar>zbarexp(n) %redefinición de la Tpropuesta;
                    %tener en cuenta que Zbar y T son directamente
                    %proporcionales.

        Tf=y;
    else
        Ti=y;
    end

    p=p+1;

end

end

%generación de la matriz "salida", con los datos: densidad,
%temperatura, zbar calculado, zbar experimental(asociado
%a cada densidad),error cometido en el cálculo y n° de iteraciones
    salida(n,1:7)=[c(n) x y zbar zbarexp(n) error p-1];

end
```

---

```
    dir='Diagnosis';
    archivo_salida=strcat(dir,'\','diagnosis',datos,'.dat');
    sal=fopen(archivo_salida,'w');
for i=1:n
    fprintf(sal,'%6.3e %6.3e %6.3e %6.3e %6.3e %6.3e %6.3e\n',salida(i,1:7));
end
fclose(sal);
```

## 4 Resultados. Desarrollo de la Interfaz Gráfica de Usuario PARPRA

### 4.1 Introducción a la creación de una Interfaz Gráfica con MATLAB.

Una interfaz gráfica de usuario (GUI, de su acrónimo inglés *Graphical User Interface*), es una pantalla gráfica distribuida en una o más ventanas que contienen 'controles' que permiten al usuario desarrollar tareas de forma interactiva, sin necesidad de generar un script en línea de comandos y sin ni siquiera entender en detalle cómo se desarrollan estas tareas.

En código MATLAB, la propia interfaz gráfica, y dentro de ella cada 'control', tiene una o más subrutinas escritas por el diseñador en forma de código ejecutable de MATLAB conocidas como *callbacks*, llamadas así por el hecho de que 'llaman' a MATLAB con el fin de ejecutar tareas. La ejecución de cada *callback* se activa a través del usuario mediante la pulsación de un botón de la pantalla o del propio ratón, la selección de un elemento de un menú desplegable, la introducción de valores numéricos o caracteres en un cuadro de texto, etc,. El creador de la interfaz, haciendo uso de los *callbacks* puede hacer que cada componente de la ventana haga su función cuando el usuario manipule ratón o teclado.

Se pueden construir Interfaces Gráficas con MATLAB de dos formas distintas:

- Usando el entorno de desarrollo de Interfaces Gráficas de MATLAB, GUIDE (GUI Development Environment).
- Creando códigos MATLAB que generarán la Interfaz Gráfica como funciones o scripts.

La Interfaz que se presenta en esta memoria se ha desarrollado en el entorno GUIDE de MATLAB, que comienza con una figura que puede irse completando con los componentes deseados en el desarrollo de la interfaz y que además, facilitando su realización, se incluyen en un entorno de edición de diseño gráfico. A su vez, la herramienta GUIDE crea un código



asociado que contiene los *callbacks* de la GUI y sus componentes y guarda tanto este código en forma de archivo `.m` como la figura en forma de *FIG-file* o archivo `.fig`.

A través del entorno GUIDE, la mayoría de las propiedades de la figura se definen en la figura misma. Cada definición se almacena en el archivo `.fig`, quedando para el archivo de código las llamadas o *callbacks* y otras funciones que se inicializan al abrir la interfaz.

Se introduce al lector al uso real de la herramienta GUIDE para la generación de Interfaces Gráficas en la siguiente sección.

## 4.2 Introducción a los controles de una Interfaz de Usuario desarrollada con GUIDE.

Para crear una nueva GUI con GUIDE, basta teclear en el *prompt* de MATLAB la palabra *guide* y elegir la opción *crear un nuevo GUI*. Automáticamente, MATLAB generará los dos archivos asociados con el nombre que se elija. La ventana sobre la que trabajaremos es la llamada **panel de control de GUIDE** (Figura 4.1)

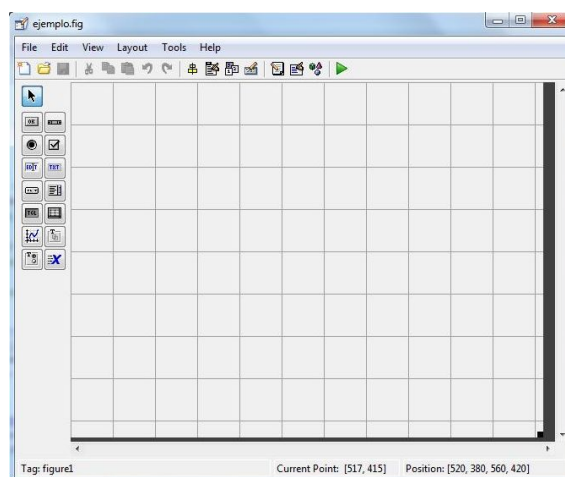


Figura 4.1. *Panel de control GUIDE.*

A la izquierda del panel se observa un menú de iconos que corresponden a los llamados *UICONTROLS*. Éstos son cajas de texto y botones que permiten ejecutar una acción previamente programada por el diseñador de la interfaz.

Además de estos objetos, en una Interfaz Gráfica desarrollada con MATLAB, se encuentran los *UIMENUS*, que son menús que se añaden al ya existente en la parte superior de la figura, los *UICONTEXTMENUS* que son menús que se asocian a cualquier objeto y se activan con el botón derecho del ratón y los objetos *AXES* que definen la región dentro de la figura donde se ubicarán representaciones e imágenes.

En la parte superior del panel se observan también iconos, entre los que se encuentran la herramienta de alineado, el editor de menús, el inspector de propiedades, el editor del archivo `.m` o el icono *Run Figure* que abrirá la figura con todos los objetos activos.

Se describen a continuación los objetos *UICONTROLS*, que son los necesarios para conocer el diseño de la Interfaz presentada aquí.

- ***Push Button***: Se trata de un botón que permite accionar la acción programada por el diseñador cuando se hace clic sobre él con el ratón.
- ***Slider***: Se trata de una barra rectangular que ejecuta la acción programada en base a un parámetro que cambia de valor al deslizar el ratón sobre ella.
- ***Radio Button***: Se trata de un botón que ejecuta una acción al ser presionada. Esta acción se mantiene mientras el botón esté pulsado. Permite elegir entre opciones.
- ***Check Box***: Al igual que el objeto anterior, se trata de un botón que ejecuta una acción al ser presionado. Esta acción se mantiene mientras el botón esté pulsado. Permite elegir entre opciones.
- ***Edit Text***: Se trata de una caja de texto editable, que permite introducir datos sobre la propia figura.
- ***Static Text***: Se trata de una caja de texto estático, que puede mostrar cualquier leyenda y puede colocarse en cualquier lugar.
- ***Pop-Up Menu***: Se trata de un desplegable que muestra alternativas posibles a la elección del usuario.
- ***Listbox***: Al igual que el objeto anterior, se trata de un desplegable que muestra alternativas posibles a la elección del usuario.
- ***Toggle Button***: Se trata de un botón que ejecuta una acción al ser presionada. Esta acción se mantiene mientras el botón esté pulsado. Permite elegir entre opciones.

Además de los anteriores, botones como ***Frame*** o ***Button Group*** sirven para agrupar varios botones.

Por otro lado, cada *UICONTROL* presenta unas propiedades que pueden ser modificadas por el diseñador de la interfaz, como son el color, tamaño o posición del objeto, el texto que aparece sobre él en la pantalla, su posible activación o desactivación, etc.

Hasta ahora, en esta sección se ha hecho una leve introducción al uso inicial de la herramienta GUIDE y sus controles. En cualquier caso, para más información, se remite al lector a consultar la bibliografía [21] y [22].

### 4.3 Descripción de la interfaz desarrollada.

En el marco teórico ya visto en el Capítulo 2 de esta Memoria, la interfaz desarrollada pretende ser una herramienta de uso sencillo en la parametrización de propiedades microscópicas de plasmas.

Se comienza con una pantalla de presentación en la que ya se da al usuario la posibilidad de elegir entre varias alternativas. Podrá comenzar interactuando con la interfaz en el cálculo de las propiedades que posteriormente elija, podrá consultar el apartado correspondiente a la ayuda o conocer detalles sobre la autoría de la propia interfaz. Ver figura 4.2.



Figura 4.2. Pantalla de presentación de la interfaz gráfica desarrollada.

Se va a considerar que en primera elección el usuario de la interfaz va a elegir el botón *Comenzar*. Al acceder a este camino, el interesado encontrará la pantalla de *elección de opciones*, donde podrá elegir el tipo de plasma con el que desea trabajar, mono o multicomponente y también la tarea a realizar, bien Ajuste-Representación Gráfica, Mapa termodinámico o Diagnóstico de Temperatura. Ver figura 4.3.

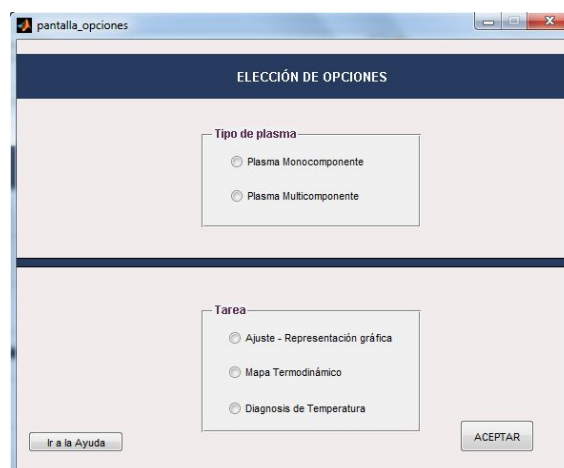


Figura 4.3. Pantalla de opciones de tarea de la interfaz gráfica desarrollada.

Al elegir las opciones deseadas habrá que hacer clic en el botón con la leyenda *ACEPTAR*. En caso de necesitar ayuda en esta pantalla se podrá acceder a la *Ayuda* con el botón que lo indica.

Para hacer un estudio pormenorizado del funcionamiento de las pantallas y la distribución de tareas se van a contemplar varios supuestos a modo de ejemplos.

#### 4.3.1 Ejemplo 1: *Ajuste de un plasma monocomponente y posterior representación gráfica.*

Se comienza trabajando el caso en que la elección combinada sea *Plasma monocomponente - Ajuste*. La siguiente pantalla que se encuentra es la que se presenta en la figura 4.4.



Figura 4.4. Pantalla de ajuste de un plasma monodimensional de la interfaz gráfica desarrollada.

Se eligen, a modo de ejemplo, las siguientes variables:

- Elemento *Xenón*, de entre las siguientes opciones: *Carbono*, *Nitrógeno*, *Oxígeno*, *Kriptón* y *Xenón*.
- Magnitud *Ionización media*, de entre las siguientes opciones: *Ionización media*, *Opacidad media de Planck*, *Opacidad media de Rosseland* y *Radiative Power Loss*.
- Tasa de error en el ajuste al 1%.
- Rango de densidad, medido en  $cm^{-3}$ ,  $[10^{-5} - 10^{-3}]cm^{-3}$ .
- Rango de Temperatura, medido en  $eV$ ,  $[1 - 20]eV$ .

Una vez elegidas las variables, para ejecutar el ajuste es necesario pulsar el botón *ACEPTAR*. Igual que en la pantalla anterior, se introduce también un botón que consulta la *Ayuda* y además se ha incluido la posibilidad de *VOLVER* a la pantalla anterior por si se ha cambiado de idea respecto a la tarea elegida.

Al pulsar el botón *ACEPTAR*, sea cual sea la magnitud elegida, primero se activará el programa *creacion.m* para generar los archivos de datos de las cuatro magnitudes susceptibles de ser ajustadas. Estos archivos, con los nombres *zbarSAHA.dat*, *opSAHA.dat*,

*orSAHA.dat*, *rplSAHA.dat*, *zbarCRSS*, *opCRSS.dat*, *orCRSS.dat*, *rplCRSS.dat*, se van a guardar en las carpetas *CRSS* y *SAHA* previamente creadas en la carpeta *BasesDatos* que tiene que estar en el directorio de ejecución de la interfaz (Ver la *Ayuda* para más información).

Terminado el proceso de *creación*, pasa a ejecutarse el programa *fitsurface.m*. Como ya se introdujo, este código realizará el ajuste de la magnitud elegida en la pantalla de la interfaz, *Xe* en el ejemplo. Como resultado de la finalización del ajuste, la interfaz mostrará el mensaje de la figura 4.5.

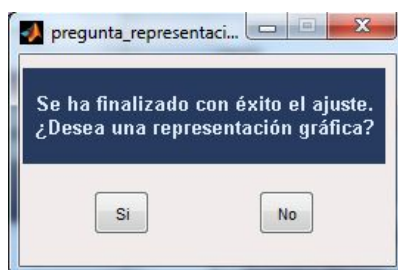


Figura 4.5. Pantalla de finalización de ajuste.

En esta pantalla se da al usuario la opción de hacer una representación gráfica usando el ajuste de la magnitud elegida. Esta opción se llevará a cabo pulsando el botón *Si*. Sin embargo, si la respuesta es *No*, se deriva de nuevo a la pantalla vista en la figura 4.4, donde si se desea, podrán seleccionarse de nuevo cualquiera de las variables propuestas. Por ejemplo, podrían ajustarse todas las magnitudes para un mismo elemento o cambiar el elemento para estudiar el comportamiento de una magnitud dada, o cambiar los rangos de densidad, o de temperatura, etc.

Si la intención es usar el ajuste obtenido para realizar una representación, la pantalla a la que lleva esta opción es la expuesta en la figura 4.6.



Figura 4.6. Pantalla de opciones de representación gráfica.

En esta pantalla aparecen dos grupos diferenciados de controles. En uno se ha de elegir el modelo de densidad que interesa, electrónica o de materia. En el otro, el tipo de representación. Se ofrece la posibilidad de hacer una representación tanto tridimensional como bidimensionalmente (ver las figuras 4.7 y 4.8). En el gráfico 3D, se representa la magnitud ajustada (la ionización media en el ejemplo escogido) frente a densidad y temperatura, siendo el gráfico 2D una proyección de la misma magnitud en estudio sobre el plano densidad - temperatura.

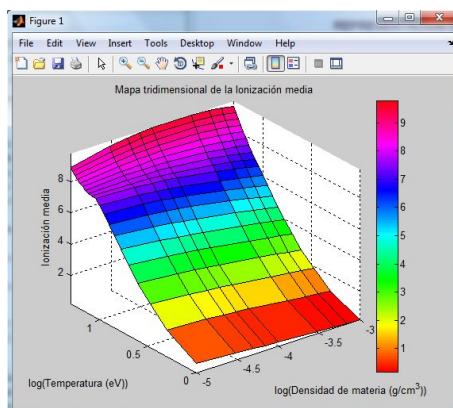


Figura 4.7. *Ejemplo de representación tridimensional.*

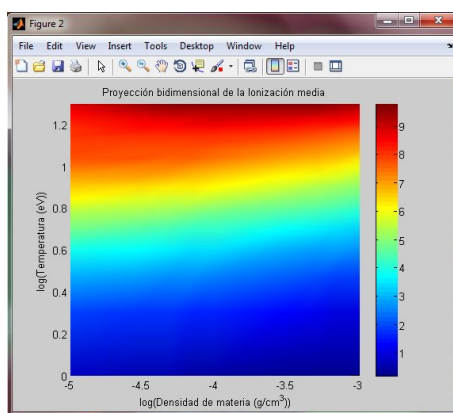


Figura 4.8. *Ejemplo de representación bidimensional.*

Otros modelos de representación proporcionados son, dados tres valores de densidad o de temperatura, que se introducirán por pantalla por el propio usuario, la representación de la magnitud en estudio frente a temperatura o densidad para cada uno de esos valores escogidos (ver figuras 4.9 y 4.11). Las pantallas para optar a estos últimos tipos de representaciones son las expuestas en las figuras 4.10 y 4.12. Bastaría con introducir los valores deseados de densidades o temperaturas, según qué se esté representando, y pulsar el botón *Ir*. Se puede observar además que se ha establecido una leyenda sobre los pulsadores que,

al activarse, deja constancia de cual es la magnitud que se va a representar. Esto se observa claramente al comparar el bloque de representación en las figuras 4.6 y 4.10 ó 4.12.

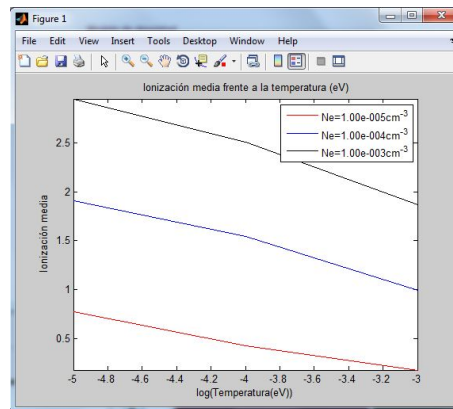


Figura 4.9. Ejemplo de representación gráfica de ionización media frente a temperatura para valores preelegidos de densidad.



Figura 4.10. Pantalla de elección de las densidades a representar.

Cada representación gráfica que se desee hacer se abrirá en una pantalla diferente en el propio editor de MATLAB. De este modo, la persona usuaria de la interfaz puede modificar cuántas opciones quiera: rotar la figura, añadir cambios en los rótulos, cambiar colores, añadir textos, añadir la barra de color, usar el zoom, guardar o imprimir la figura, etc, haciendo uso de cualquiera de las herramientas que presta MATLAB en su editor de figuras.

#### 4.3.2 Ejemplo 2: Realización de un mapa termodinámico.

Para la explicación de este ejemplo de aplicación se parte de la pantalla en la que se elige la opción a realizar, ya vista en la figura 4.3. Se escoge un plasma monocomponente y

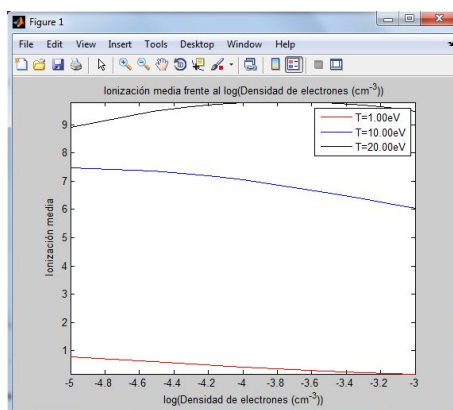


Figura 4.11. Ejemplo de representación gráfica de ionización media frente a temperatura para valores preelegidos de temperatura.



Figura 4.12. Pantalla de elección de las temperaturas a representar.

la realización del mapa termodinámico. La respuesta que se tiene al *Aceptar* es la pantalla de la figura 4.13.

En dicha figura se pueden elegir tanto el modelo de densidad a utilizar como el elemento del que se quiere hacer la representación del mapa termodinámico, a elegir entre los mismos ya nombrados en el inicio del ejemplo 1. En este caso, se ha optado por hacer el mapa termodinámico del elemento *Kriptón* para el modelo de *densidad electrónica* ( $\text{cm}^{-3}$ ). Como todas las demás, la pantalla incluye un botón para *VOLVER* que retorna al usuario a la pantalla de inicio en la que se eligen tipo de plasma y tarea (ver figura 4.3) y un botón con la leyenda *Ir a la Ayuda* que invita a visitar la Ayuda incluida en la interfaz en caso de ser necesaria. La representación del mapa termodinámico se abre como el resto de representaciones gráficas en el editor de figuras de MATLAB, con lo que añadir cualquier modificación que se considere oportuna es muy sencillo. Al pulsar el botón *ACEPTAR* se abre la ventana de la figura en la que, para el Kriptón, el aspecto que presenta el mapa



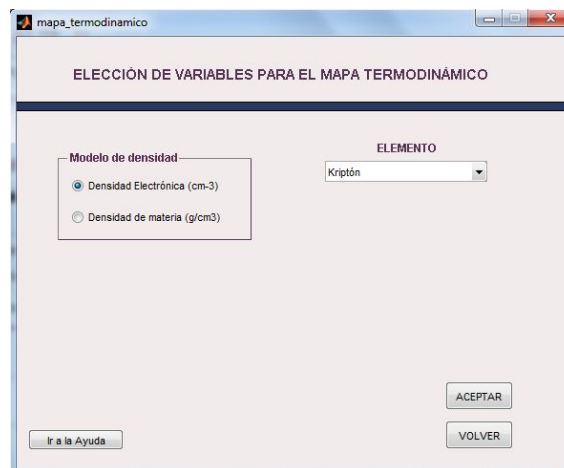


Figura 4.13. Pantalla de elección de variables para el mapa termodinámico.

termodinámico en las regiones de temperatura y densidad mostradas es el que puede verse en la figura 4.14.

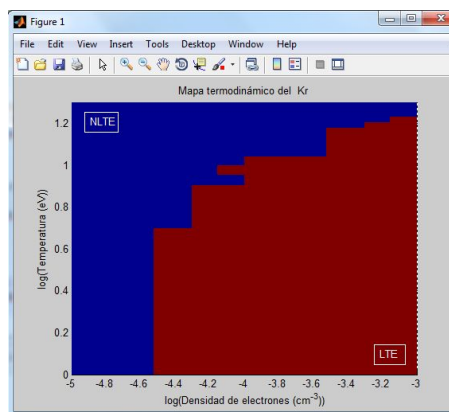


Figura 4.14. Ejemplo de representación del mapa termodinámico del Kriptón.

### 4.3.3 Ejemplo 3: Diagnóstico de la temperatura.

Como se adelantó en el Capítulo 3, la diagnosis de la temperatura que se ofrece en esta memoria se basa en un experimento concreto que consiste en reproducir y estudiar en laboratorio ondas de choque que pierden energía al emitir radiación. En este experimento, la densidad electrónica y la densidad de materia del medio son datos medibles, pero no así la temperatura, que queda como parámetro a determinar [18].

Es importante decir en este punto que para poder acceder a este propósito para un elemento de interés, antes ha de haberse ejecutado el bloque de *Plasma monocomponente - Ajuste*, para poder disponer de los archivos de ajuste necesarios en la elaboración de la diagnosis. Si este paso previo no ha sido resuelto, la opción *Diagnosis de la temperatura* no es factible. (Para mayor información, consultar la *Ayuda*).

El punto de partida de este ejemplo es la indicación de cómo generar los ficheros de datos que servirán de entrada a la diagnosis. Estos ficheros deberán construirse por el usuario y tener un formato concreto, que puede conocerse en cualquier momento a través de la interfaz sólo con consultar la *Ayuda* suministrada, y además estar colocado en el directorio de trabajo de la interfaz dentro de una carpeta creada a tal efecto, llamada *Diagnosis*. Utilizando un archivo *.xls*, el formato apropiado sería el siguiente: una primera columna con las coordenadas radiales del perfil de densidad de la onda de choque radiativa medidas experimentalmente e introducidas en *cm* y una segunda columna con los valores de las densidades electrónicas correspondientes a dicho perfil. Ambas columnas se posicionarán a partir de la segunda fila del archivo (se ha supuesto que la primera fila va con los rótulos informativos pertinentes de las variables).

En el caso que se va a ejemplificar, el archivo de entrada lleva como nombre *11ns.xls*, que incluye las columnas coordenadas - densidades para el instante experimental igual a 11ns (ver figura 4.15). La representación de este archivo puede verse en la figura 3.6 con el rótulo *11ns*.

The screenshot shows a graphical user interface for a temperature diagnosis program. The window is titled 'diagnosis' and has a header 'DIAGNOSIS DE LA TEMPERATURA'. The main area contains several input fields and buttons. The first section is labeled 'Introduzca el nombre del fichero:' and has a text box containing '11ns'. Below this is a section for 'ELEMENTO' with a dropdown menu showing 'Xenón' and a 'Número másico del elemento' field with the value '131.293'. The next section is a box containing three fields: 'Anchura del shock (cm)' with '0.0037', 'Densidad de materia (g/cm-3)' with '1.6e-4', and 'Radio del shock (cm)' with '0.0236'. At the bottom of the window are three buttons: 'Ir a la Ayuda', 'ACEPTAR', and 'VOLVER'.

Figura 4.15. Pantalla de estudio de la diagnosis de temperatura.

Como puede consultarse en la figura 4.15, además de solicitar el nombre del fichero de entrada, la ventana solicita por pantalla las variables: *Elemento*, *Número másico del elemento*, *Densidad de materia*, *Radio del shock* y *Anchura del shock*. Todas estas variables son necesarias en el algoritmo de búsqueda de la temperatura. Por supuesto, *Densidad de materia*, *Radio del shock* y *Anchura del shock* vendrán determinados por el propio experimento y por tanto, deberán ser conocidos por el usuario.

Una vez completadas todas las celdas, se podrá *ACEPTAR* en la pantalla para confirmar los datos para la ejecución, o bien, como en cualquier ventana presentada, *VOLVER* a la pantalla de inicio (figura 4.3) o consultar la *Ayuda*.

Al *ACEPTAR*, se realiza la diagnosis de la temperatura, dando como resultado un fichero *.dat* en el que se recogen las coordenadas y densidades del archivo de entrada

suministrado más una columna de *Ionización Media* experimental asociada, que recibirá como nombre *zbarexp\*.dat* y también un archivo de salida con las columnas *Coordenadas*, *Densidades*, *Temperaturas diagnosticadas*, *Ionización media teórica*, *Ionización media experimental*, *error cometido* (calculado en función de la diferencia entre ionización media experimental y teórica) y *Número de iteraciones* necesarias para el cálculo con nombre *diagnosis\*.dat*. Tener en cuenta que los asteriscos en esta memoria no hacen sino representar el nombre del archivo de datos de entrada suministrado por pantalla. En el caso que aquí se propone, los ficheros resultantes son *zbarexp11ns.dat* y *diagnosis11ns.dat*. Ambos ficheros se localizarán en la carpeta *Diagnosis*.

Como resultado del éxito de la ejecución, se genera la ventana de la figura 4.16.

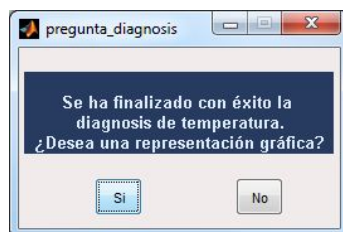


Figura 4.16. Pantalla de finalización de la diagnosis de temperatura.

En esta ventana se ofrece al usuario la posibilidad de hacer representaciones gráficas con los resultados obtenidos. Para aceptar esta opción será necesario pulsar *Sí*. Si no se desea, se pulsaría *No*, dejando este camino en la pantalla 4.15.

En la pantalla de representaciones, se dará la opción de estudiar gráficamente las variables, *Ionización media Teórica frente a Coordenadas*, *Ionización media Teórica frente a Densidades*, *Ionización media Teórica frente a Temperatura diagnosticada* y *Temperatura diagnosticada frente a Coordenadas*. Se ve en la figura 4.17.



Figura 4.17. Pantalla de representaciones de la diagnosis de temperatura.

Por supuesto, en esta pantalla se da paso a la *Ayuda* por si fuera de utilidad y también se dispone del botón *VOLVER* que llevará a la pantalla 4.15.

Como resultado de pulsar en cualquiera de las representaciones propuestas se abrirá una ventana con el editor de figuras de MATLAB del mismo modo que ya se ha comentado anteriormente. En el ejemplo que aquí se propone, y como la variable diagnosticada es la temperatura, se ha elegido hacer el estudio de *Temperatura diagnosticada frente a Coordenadas* que puede examinarse en la figura 4.18.

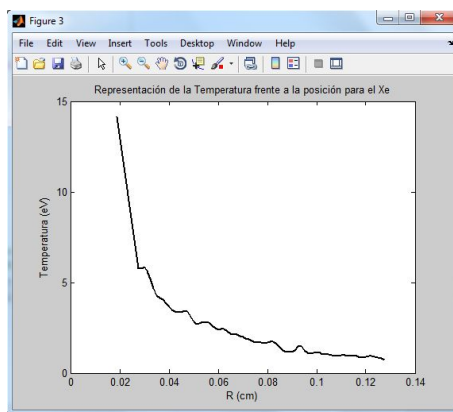


Figura 4.18. Ejemplo de representación de la diagnosis de temperatura.

#### 4.3.4 Ejemplo 4: Ejemplo de representación gráfica para un plasma multicomponente.

Desarrollar este ejemplo comienza con la pantalla de inicio ya mostrada anteriormente y referenciada como figura 4.3. Es muy importante hacer constar en este momento la necesidad de, antes de poder tomar la acción de *plasma multicomponente*, haber realizado el *Ajuste* para los elementos en los que se tenga interés como componentes del plasma. Si este paso previo no ha sido resuelto, la opción *Plasma Multicomponente* no es factible. (Para mayor información, consultar la *Ayuda*.)

En la pantalla de inicio se elegiría el par de opciones *Plasma Multicomponente - Representación gráfica*. Se trata ésta de la única opción desarrollable en esta memoria. Por un lado, la *Diagnosis de Temperatura* está pensada para analizar experimentos concretos en los que, hasta ahora, sólo se han usado plasmas monocomponente. Por otro lado, la construcción del mapa termodinámico de una mezcla no tiene mayor interés por poder estudiarse cada elemento por separado y además, para los rangos de densidad y temperatura propuestos, puede suceder que uno de los elementos esté en LTE y el otro en NLTE. Así, intentar estudiar cualquiera de estas dos opciones llevará a un mensaje de error como el que se muestra en la figura 4.19.

*ACEPTAR* la opción permitida en la pantalla llevaría al usuario por el siguiente camino; La pantalla sobre la que se trabajará en la elección de las variables necesarias para la ejecución de la representación considerado el plasma multicomponente, es la mostrada en la figura 4.20. Las variables que se han de elegir son *Elemento 1*, *Elemento 2*, *Magnitud*,



Figura 4.19. Mensaje de error: Opción no permitida.

*Fracción Molar*, *Rango de densidad* y *Rango de temperatura*. Elementos 1 y 2 son los componentes del plasma, composición que se hará en función de la *fracción molar* que se imponga a la mezcla. Únicamente es necesario introducir la *fracción molar* de uno de los componentes en una mezcla con sólo dos elementos, ya que por definición  $\sum_{i=1}^n x_i = x_{i1} + x_{i2} + \dots + x_{in} = 1$ . Así, las variables que se imponen en este ejemplo son:

- Elemento 1: *Oxígeno*, de entre las opciones: *Carbono*, *Oxígeno* y *Nitrógeno*.
- Elemento 2: *Nitrógeno*, de entre las opciones: *Carbono*, *Oxígeno* y *Nitrógeno*.
- Magnitud: *Opacidad media de Planck*, de entre las siguientes opciones: *Ionización media*, *Opacidad media de Planck* y *Radiative Power Loss*.
- Fracción Molar del primer componente de la mezcla:  $x_{i1} = 0.6$ .
- Rango de densidad, medido en  $cm^{-3}$ ,  $[10^{-5} - 10^{-3}]cm^{-3}$ .
- Rango de Temperatura, medido en  $eV$ ,  $[1 - 20]eV$ .

Figura 4.20. Pantalla de elección de variables para un plasma multicomponente.

Una vez elegidas las variables, serían confirmadas pulsando el botón *ACEPTAR* y se pasaría automáticamente a la pantalla de título *representación gráfica de plasmas multicomponentes*. No obstante, como se puede ver, además de *ACEPTAR* las variables, como

en las demás pantallas vistas, también puede consultarse la *Ayuda* o volver a la ventana anterior si fuera necesario.

El funcionamiento de la pantalla donde elegir el modelo de representación (figura 4.21) es idéntico al ya visto en el *Ejemplo 1* (ver figura 4.6).



Figura 4.21. Pantalla de opciones de representación gráfica para un plasma multicomponente.

No se ahonda, por tanto, en la explicación de esta pantalla ni en cuáles son sus resultados por no introducir nada nuevo a lo ya visto. Únicamente, a modo de ejemplo, se muestra la representación tridimensional de la *Opacidad media de Planck* para un plasma compuesto de Oxígeno al 60 % y Nitrógeno al 40 % en los rangos de densidad y temperatura determinados en la ventana 4.20. Como en todos los casos en los que se ha mostrado una representación anteriormente, el gráfico se abre en el editor de figuras de MATLAB, con las ventajas ya mencionadas.

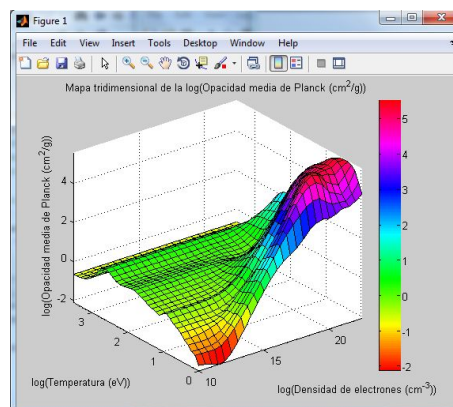


Figura 4.22. Ejemplo de representación tridimensional de opacidad media de Planck frente a densidad y temperatura.

#### 4.3.5 Descripción de la *Ayuda* de PARPRA.

La *Ayuda* insertada en la interfaz de usuario **PARPRA** está basada en un menú donde se puede encontrar toda la información necesaria para poder hacer un manejo eficaz de cada aplicación suministrada por la interfaz. Para poder acceder a la información, bastará con pulsar el botón con la leyenda *OK* junto a la opción del menú elegida. Se abrirá entonces una ventana con un archivo *.pdf* en el que se desarrollará la ayuda. Ver figura 4.23.

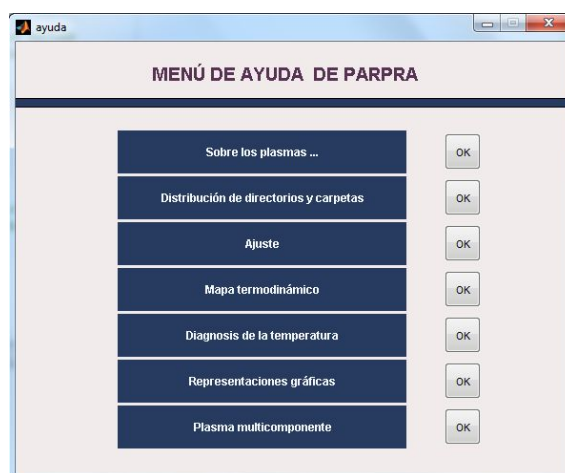


Figura 4.23. *Pantalla menú de ayuda.*

Se considera, por ejemplo, que se desea conocer la información existente bajo el rótulo *Sobre los plasmas....* En este caso, tras hacer *OK*, el usuario podría acceder a un documento como del que se muestra un fragmento en la figura 4.24. Del mismo modo, con cualquier elemento del menú.

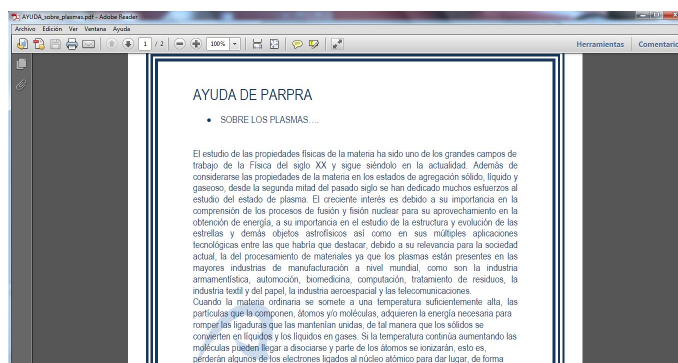


Figura 4.24. *Ejemplo del menú de ayuda.*

## 5 Conclusiones, trabajos publicados y líneas futuras.

### 5.1 Conclusiones.

Las principales conclusiones de este trabajo son las que a continuación se enumeran:

1. Se ha desarrollado una herramienta computacional en MATLAB cuyo principal objetivo es la parametrización biparamétrica (en función de las condiciones de densidad y temperatura del plasmas) de propiedades radiativas relevantes en Física de Plasmas, lo cual es muy importante para evitar cálculos muy costosos computacionalmente en simulaciones hidrodinámicas *on-line*. Hay que resaltar que la parametrización sea tanto en términos de densidad y temperatura ya que hasta la actualidad la práctica mayoría de las parametrizaciones existentes en la bibliografía son uniparamétricas (en función de la densidad). Para la parametrización se han empleado funciones polinómicas cuyos coeficientes son determinados empleando un método de ajuste por mínimos cuadrados. Además, con el fin de optimizar el proceso de división del espacio de condiciones de plasma para la búsqueda de los polinomios de ajuste, se ha implementado en la herramienta un método QuadTree.
2. La herramienta desarrollada se ha empleado en tres aplicaciones muy útiles: obtención de propiedades radiativas de mezclas binarias, la diagnosis de la temperatura de plasmas astrofísicos recreados en laboratorio y la obtención de los mapas termodinámicos de los plasmas.
3. Para hacer más cómodo y útil el uso de la herramienta desarrollada, esta se ha integrado en una interfaz gráfica generada usando la aplicación GUIDE de MATLAB.

### 5.2 Líneas futuras

En lo que se refiere a las líneas futuras, se pueden citar como inmediatas las siguientes:

1. Generalización del método de ajuste de las propiedades radiativas cuando estas son funciones de tres parámetros: densidad, temperatura y fracción molar (mezclas de



más de dos componentes, muy importantes en Astrofísica) o densidad, temperatura y temperatura de la radiación (en plasmas fotoionizados, tópico de especial relevancia actualmente en este área). Para la optimización en la división del espacio de búsqueda de los polinomios se implementaría un método OcTree.

2. Extender el método de ajuste desarrollado para la parametrización de las propiedades termodinámicas del plasma, generando las bases de datos de las mismas empleando ecuaciones de estado de cierta complejidad y generalidad. Esta es una tarea también muy interesante puesto que también son un componente fundamental en las ecuaciones hidrodinámicas.
3. En lo que se refiere a las aplicaciones de la herramienta de ajuste es un objetivo futuro desarrollar e incorporar a esta herramienta un módulo para la generación de mapas hidrodinámicos que permiten clasificar, por ejemplo, las ondas de choque como radiativas o no y si un plasma es ópticamente grueso o delgado, haciendo uso para ello de las opacidades medias y la pérdida de potencia radiativa del plasma previamente ajustadas.

### 5.3 Comunicaciones a congresos y artículos publicados.

#### Artículos publicados en revistas internacionales

- R. Rodríguez, J.M. Gil, **G. Espinosa**, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, P. Martel, E. Minguez, D.R. Symes, M. Hohenberger and R.A. Smith, *Determination and analysis of plasma parameters for simulations of radiative blast waves launched in clusters of xenon and krypton*, Plasma Physics and Controlled Fusion 54, 045012 (2012).
- J.M. Gil, R. Rodríguez, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, A. de la Nuez, **G. Espinosa**, P. Martel and E. Minguez. *Parametrization of the average ionization and radiative cooling rates of carbon plasmas in a wide range of density and temperature*, enviado para su publicación en el Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer (2012).
- R. Rodriguez, J.M. Gil, **G. Espinosa**, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, P. Martel, E. Minguez, D.R. Symes, M. Hohenberger, R.A. Smith *Analysis of microscopic magnitudes of radiative blast waves launched in xenon clusters with collisional-radiative simulations*, enviado para su publicación en el High Energy Density Physics (2012).

**Comunicaciones a Congresos**

- R. Rodriguez, J. M. Gil, **G. Espinosa**, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, P. Martel, E. Minguez, D.R. Symes, M. Hohenberger, R.A. Smith *Microscopic analysis of radiative blast waves launched in xenon clusters*. 39th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Estocolmo (Suecia), 2 - 6 July 2012.
- R. Rodriguez, J.M. Gil, **G. Espinosa**, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, P. Martel, E. Minguez, D.R. Symes, M. Hohenberger, R.A. Smith *Analysis of microscopic magnitudes of radiative blast waves launched in xenon clusters with collisional-radiative simulations*, aceptado para The 16th International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter, Santa Bárbara (USA), November 5-9, 2012.

# Bibliografía

- [1] R.D. Bates, A.E. Kingston, and R.P.W. McWhirther. Recombination between electrons and atomic ions. i. optically thin plasmas. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 267:297–312, 1962.
- [2] R.W.P. McWhirther. Data needs, priorities and accuracies for plasma spectroscopy. *Phys. Rep.*, 37:165–209, 1978.
- [3] R. D. Cowan. *The theory of atomic structure and spectra*. University of California Press, 1981.
- [4] I. I. Sobelman. *Atomic Spectra and Radiative Transitions*. Springer-Verlag, 1992.
- [5] D. Salzmänn. *Atomic Physics in Hot Plasmas*. Oxford University Press, 1998.
- [6] R. Rodríguez, J. M. Gil, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, P. Martel, and E. Mínguez. Determination and analysis of the thermodynamic regimes of xenon plasmas. *Contrib. Plasma Phys.*, 51:863–876, 2011.
- [7] H.K. Chung, K.B. Fournier, and R.W. Lee. Non-lte kinetics modelling of krypton ions: calculation of radiative cooling coefficients. *High Energy Density Phys.*, 2:7–15, 2006.
- [8] R. Rodríguez, R. Florido, J.M. Gil, J.G. Rubiano, , D. Suárez, P. Martel, E. Mínguez, and R.C. Mancini. Collisional-radiative calculations of optically thin and thick plasmas using the computational package abako/rapcal. *Comm. Comput. Physics*, 8:185–210, 2010.
- [9] R. Florido, R. Rodríguez, J.M. Gil, J.G. Rubiano, P. Martel, E. Mínguez, and R.C. Mancini. Modeling of population kinetics of plasmas that are not in local thermodynamic equilibrium, using a versatile collisional-radiative model based on analytical rates. *Phys. Rev. E*, 80:056042, 2009.
- [10] R. Rodríguez, R. Florido, J.M. Gil, J.G. Rubiano, P. Martel, M.A. Mendoza, D. Suárez, and E. Mínguez. Detailed-level-accounting approach calculation of radiative properties of aluminium plasmas in a wide range of density and temperature. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 112:042002, 2008.

- [11] E. Minguez, R. Florido, R. Rodriguez, J.M. Gil, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, and P. Martel. Opacity calculation for target physics using the abako/rapcal code. *HEDP*, 6:57–65, 2010.
- [12] J.M. Gil, R. Rodriguez, R. Florido, J.G. Rubiano, P. Martel, E. Minguez, P. Sauvan, P. Angelo, R. Schott, E. Dalimier, and R. Mancini. Spectrally resolved intensities of ultra-dense hot aluminium plasmas. In *19th Internacional Conference on Spectral Line Shapes*, volume 1058, pages 75–77. American Institute of Physics, 2008.
- [13] R. Florido, T. Nagayama, R. C. Mancini, R. Tomasini, J. A. Deletrees, S. P. Regan, V.A. Smalyuk, R. Rodriguez, and J. M. Gil. Analysis of time-resolved argon line spectra from omega direct-drive implosions. *Rev. Sci. Instruments*, 79:10E310, 2008.
- [14] J. G. Rubiano, R. Florido, C. Bowen, R. W. Lee, and Y. Ralchenko. Review of the 4th NLTE code comparison workshop. *High Energy Density Phys.*, 3:225–232, 2007.
- [15] J. M. Gil, R. Rodríguez, R. Florido, J. G. Rubiano, P. Martel, and E. Mínguez. Determination of Corona, LTE and NLTE regimes of optically thin carbon plasmas. *Laser Part. Beams*, 26(21-31), 2008.
- [16] R. Rodríguez, R. Florido, J. M. Gil, J. G. Rubiano, P. Martel, and E. Mínguez. RAPCAL code: a flexible package to compute radiative properties for optically thin and thick low and high-Z plasmas in a wide range of density and temperature. *Laser Part. Beams*, 26:433–448, 2008.
- [17] D. Ryutov, R.P. Drake, J. Lane, E. Liang, B.A. Remington, and W.M. Wood-Vasey. Similarity criteria for the laboratory simulation of supernova hydrodynamics. *Astrophys. J.*, 518:821–832, 1999.
- [18] D.R. Symes, M. Hohenberger, H.W. Doyle, R.A. Smith, A.S. Moore, E.T. Gumbrell, R. Rodriguez, and J.M. Gil. Studying radiative shocks using laser driven blast waves in clustered gases. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Research A*, 653:186–188, 2011.
- [19] R. Rodriguez, J. M. Gil, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, P. Martel, E. Mínguez, D.R. Symes, M. Hohenberger, and R.A. Smith. Determination of the average ionization and thermodynamic regimes of xenon plasmas with an application to the characterization of blast waves launched in xenon clusters. *HEDP*, 7:71–76, 2011.
- [20] R. Rodriguez, J. M. Gil, G. Espinosa, R. Florido, J.G. Rubiano, M.A. Mendoza, P. Martel, E. Mínguez, D.R. Symes, M. Hohenberger, and R.A. Smith. Determination and analysis of plasma parameters for simulations of radiative blast waves launched in clusters of xenon and krypton. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 54:045012, 2012.
- [21] M. Carrera-Amuriza, A.R. y Martínez-Nebreda. *Introducción a MATLAB y a la creación de interfaces gráficas*. Servicio Editorial de la Universidad del País Vasco, 2004.

- 
- [22] Inc. The MathWorks. *MATLAB® Creating Graphical User Interfaces*. 2012.