

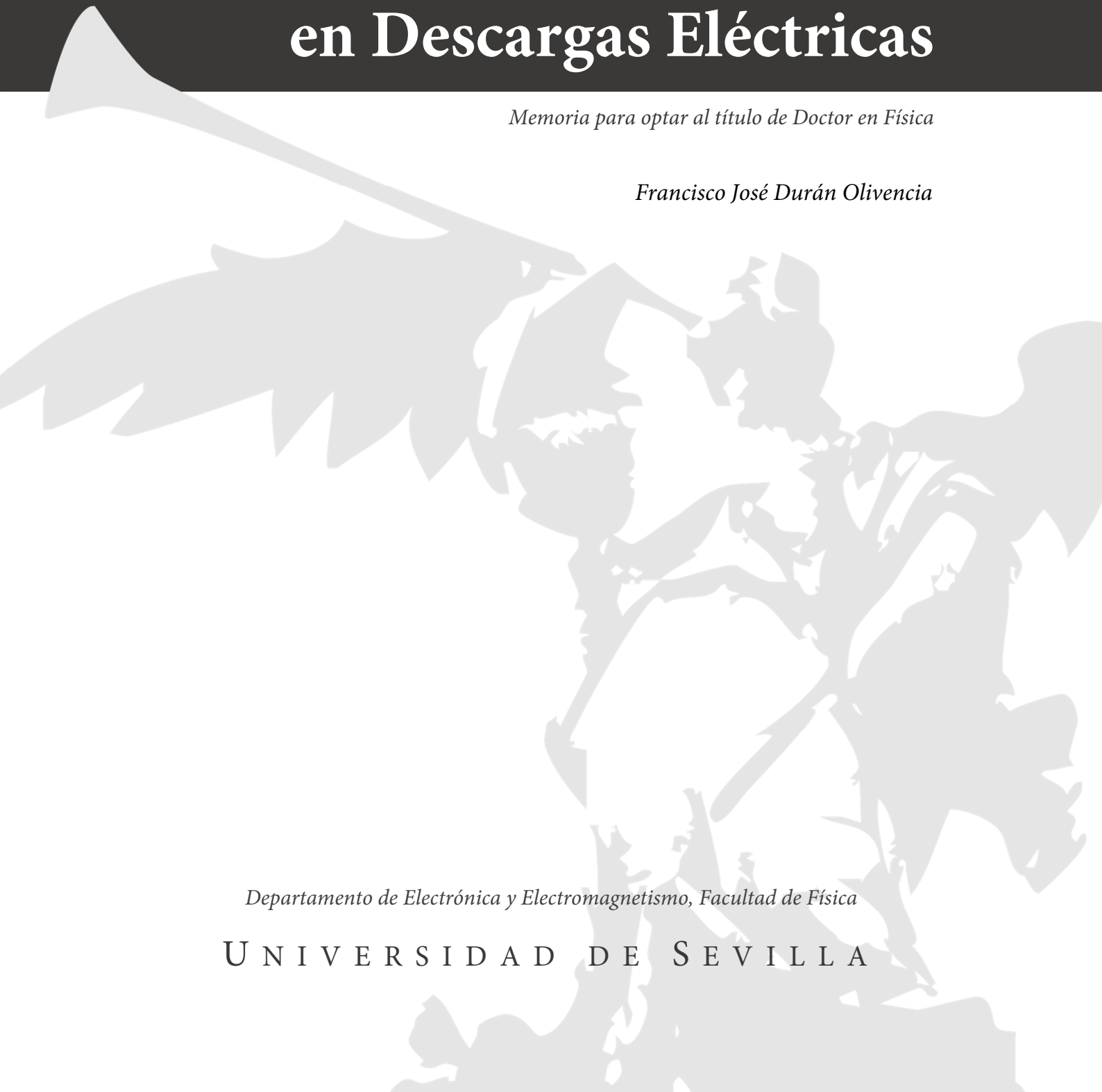
Físico-Química de los Fenómenos Transitorios en Descargas Eléctricas

Memoria para optar al título de Doctor en Física

Francisco José Durán Olivencia

Departamento de Electrónica y Electromagnetismo, Facultad de Física

U N I V E R S I D A D D E S E V I L L A



Francisco José Durán Olivencia

Físico-Química de los Fenómenos Transitorios en las Descargas Eléctricas.

Memoria para optar al título de Doctor en Física

Licenciado en Física por la Universidad de Sevilla

■■ DIRECTOR:

Francisco Pontiga Romero

Profesor Titular en el Dpto. de Física Aplicada II

Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Edificación

Universidad de Sevilla

Co-responsable de la línea de investigación Físico-Química de las Descargas

Eléctricas en Gases en el grupo EHD–MGC: Electrohidrodinámica y Medios

Granulares Cohesivos

■■ CO-DIRECTOR:

Antonio Castellanos Mata

Catedrático en el Dpto. Electrónica y Electromagnetismo

Facultad de Física

Universidad de Sevilla

Responsable principal del grupo EHD–MGC: Electrohidrodinámica y Medios

Granulares Cohesivos

■■ INSTITUCIÓN:

Dpto. Electrónica y Electromagnetismo, Facultad de Física

Dpto. de Física Aplicada II, Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Edificación

Universidad de Sevilla

Av. Reina Mercedes S/N, C.P. 41012, Sevilla, España.

Junio, 2015.

TESIS DOCTORAL

Francisco José Durán Olivencia

Físico-Química de los
fenómenos **Transitorios** en
Descargas Eléctricas

Memoria para optar al título de Doctor en Física

Físico-Química de los Fenómenos Transitorios en Descargas Eléctricas

*Tesis inscrita en el Dpto. de Electrónica y Electromagnetismo
Facultad de Física, Universidad de Sevilla, España
Junio, 2015*

Francisco José Durán Olivencia
Licenciado en Física, Universidad de Sevilla

DIRECTOR:
Francisco Pontiga Romero
*Profesor Titular
Dpto. de Física Aplicada II
Universidad de Sevilla*

CO-DIRECTOR:
Antonio Castellanos Mata
*Catedrático
Dpto. de Electrónica y Electromagnetismo
Universidad de Sevilla*

UNIVERSIDAD  SEVILLA

Dedicatoria

“Los locos abren los caminos que más tarde recorren los sabios.”

CARLOS DOSSI, Locura.

Dedicatoria

Dedicado a mis padres, a mi hermana, a mi hermano, a mi esposa Sara, a mi hijo Adrián y a todas aquellas personas que han confiado en mí y me han ayudado a desarrollar este trabajo.

Abstract/Resumen

Abstract

In the last decades, the study of the spatio-temporal evolution and development of electrical discharges have gained a prominent importance, fundamentally as regards to the possibility of controlling in space (confine) and time the different species produced during their development. Nonetheless, the interdisciplinary character of discharges turns this kind of problems into a theoretical, numerical and technological challenge.

The present work tries to shed some light in this subject, investigating the complex dynamics that interrelates all species generated in a corona discharge (point-to-plane) in pure oxygen. The integral approach adopted here provides a model in which fluid approximation, numerical scheme, chemical modelling and surface effects are intertwined and they are dealt as a whole. The results obtained show a negative ion distribution completely segregated in volume that, in addition, takes place within a characteristic time scale. Similarly, the predominance of one or another neutral species depends on the stage of the evolution of the discharge

The precise knowledge of the spatial distribution of species, together with the distribution of energy in the discharge volume provides an invaluable information towards possible technological applications.

Resumen

En las últimas décadas, el estudio de la evolución y desarrollo espacio-temporal de las descargas eléctricas ha adquirido una importancia capital, fundamentalmente en lo que respecta a la posibilidad de controlar en el espacio (confinar) y tiempo las diferentes especies producidas durante el desarrollo de las mismas. No obstante, el carácter interdisciplinar de las descargas convierte a este tipo de problemas en un reto teórico, numérico y tecnológico.

El presente trabajo trata de arrojar algo de luz sobre este tema, investigando la compleja dinámica que interrelaciona todas las especies producidas en una descarga corona (punta-plano) en oxígeno. El enfoque integral adoptado contempla un modelo en el que la aproximación fluida, el

esquema numérico, el modelo químico y los efectos de superficie quedan entrelazados y se tratan como un todo. Los resultados obtenidos muestran una distribución de carga negativa perfectamente segregada en el volumen, que además tiene lugar en una escala de tiempo característica. Análogamente, el predominio de una u otra especie neutra está determinado por la fase en el que se encuentra la evolución de la descarga.

El conocimiento de la distribución espacial de las especies junto con el de la distribución de energía en el volumen de la descarga supone una información extremadamente valiosa de cara a posibles aplicaciones tecnológicas.

Prólogo

Prólogo

En 1752 Benjamin Franklin desarrolló una teoría sobre los rayos (*lightning*), que supuso un hito histórico en la comprensión este tipo de fenómenos. Para él, los rayos podían entenderse como un **flujo de electricidad** a través del aire, lo que está esencialmente en consonancia con la interpretación actual. Desde un punto de vista fenomenológico no es difícil mostrar, entonces, que la distribución de las partículas (electrones e iones) implicadas en el flujo de tal densidad de corriente puede describirse mediante **ecuaciones de continuidad** con términos de reacción (creación/destrucción). De hecho, una buena parte de la literatura sobre las descargas eléctricas está basada en este enfoque. Por el contrario, para una imagen microscópica de las descargas (en el contexto de **gases débilmente ionizados**) se acepta que la **ecuación de Boltzmann** (BE) contiene toda la información estadística del sistema. En este trabajo, ambos enfoques se han sometido a un análisis profundo que delimita la validez de tales planteamientos.

El primer capítulo introduce el concepto de descargas eléctricas en el contexto de los plasmas, y señala (de forma cualitativa) el **efecto avalancha**, el **mecanismo de Townsend**, el concepto de *streamer* y la **distorsión del campo eléctrico local** como precursores de los diferentes modos de propagación de las descargas. En la última parte de este capítulo se presenta la clasificación tradicional de los regímenes estacionarios (DC) de las descargas eléctricas a baja presión basada en la curva característica corriente-tensión. Este tipo de descargas ha copado una parte significativa de las investigaciones en el pasado, y como resultado de ellas se han desarrollado muchas aplicaciones prácticas de uso cotidiano. Sin embargo, el estudio de las descargas transitorias despierta hoy en día tanto o más interés entre los investigadores, gracias al desarrollo de nuevas técnicas experimentales y computacionales, y a sus posibles aplicaciones tecnológicas.

En el escenario previamente citado, respecto de las ecuaciones macroscópicas y la versión microscópica vía BE, la primera parte del capítulo 2 se centra en poner en contexto el ámbito de validez de la BE. Una limitación que no se tiene en consideración a menudo cuando se formula la BE en el marco de las descargas es el hecho de que esta ecuación está suscrita a la teoría cinética de gases. Esto significa que el concepto de **colisión** tiene una carácter localizado, tal y como sugiere la intuición física. Sin embargo, cuando se interpreta las descargas como un sistema de partículas cargadas

que interaccionan entre sí en presencia de campos electromagnéticos, esta imagen intuitiva puede fallar. Prueba de ello es que la BE se obtiene de una **jerarquía BBGKI**, donde están contenidos, por defecto, todos los tipos de correlaciones entre partículas. A partir de esta jerarquía es posible establecer dos límites que permiten reducir la comprensión de un sistema de muchas partículas a partir de la función de distribución de una sola partícula. Por estas razones, no conviene aceptar *ad hoc* el uso de la BE. De manera que para delimitar su validez, en primer lugar se analiza la situación en el contexto del **equilibrio termodinámico local** (LTE). En estas condiciones surge el concepto de **longitud de Debye**, lo que permite discernir la distancia a partir de la cual una partícula cargada experimenta un **campo medio**, resultado de la acción de todas las partículas restantes, sin atender a interacciones individuales. Esto supone una enorme simplificación que reduce el cálculo del campo eléctrico por medio de una **ecuación de Poisson**. Para el caso en el que el sistema se encuentra **fuera del equilibrio**, la aproximación de campo medio no resulta tan evidente. No obstante, la condición de **régimen hidrodinámico** permite establecer una relación de escalas (espaciales y/o temporales) que delimitan la validez de la BE. Así pues, la validez de las ecuaciones fluidas, obtenidas a partir de la BE, está igualmente vinculada a estos mismos límites. Esta es una idea extremadamente potente para actuar con limitadores físicos en el contexto numérico. Otra de los puntos clave en el modelado de las descargas que se aborda en este capítulo es la interacción con las superficies (electrodos y/o paredes del volumen de la descarga). A este respecto, hay que advertir que este trabajo solo plantea los principales mecanismos implicados en este tipo de interacciones, cuantificándolos y de este modo estableciendo un criterio para discriminar que tipo de procesos incorporar en el modelo. Se omiten en esta parte (obviamente, por la dimensión en complejidad) todos los efectos de superficies asociados a flujos tangenciales, desorción, recombinación, etc.

El capítulo 3 expone el **método de los elementos finitos** (FEM) como herramienta para simular las descargas. No obstante, además de la revisión e introducción de las nociones elementales que subyacen a esta técnica, en este capítulo se exploran todas las dificultades inherentes a la formulación estándar en problemas de transporte. Así, se muestra como modificar las **funciones de forma** para estabilizar los problemas de convección dominante (en el contexto de la **discretización espacial**) y qué papel juega la **discretización temporal** en la estabilización de los términos de reacción. Para finalizar este capítulo se comparan los resultados obtenidos mediante elementos finitos (esquema estabilizado Crank-Nicholson (CN)+*streamline upwind Petrov-Galerkin* (SUPG)) con los presentados vía diferencias finitas (FD), con limitador *flux-corrected transport* (FCT), a partir del problema de

la descarga corona en el régimen de pulsos de Trichel.

Por último, el capítulo 4 trata el problema de los pulsos de Trichel bajo una **descripción multiespecie**. Este capítulo aúna todo lo visto en los capítulos 2 y 3, integrando un planteamiento físico, químico y numérico. La definición del tamaño mínimo de la malla muestra la conexión entre el modelo físico y el numérico. En cuanto a la descripción química se aborda la construcción de un **modelo químico consistente** reducido de 10 especies sobre la base de la distribución de pérdidas energéticas. Además se presta una especial atención a la hora de definir el mecanismo de **ionización** dominante. Así, no solo se analizan las vías directas, disociativa y no disociativa, sino también cuál es el papel de la **ionización por pasos** en el modelo y su relación con la ionización directa. El papel de este tipo de procesos en el desarrollo de **streamers** justifica la importancia de cuantificar la relación entre la ionización directa y por pasos. Por último, los resultados de las simulaciones muestran la compleja e intrincada dinámica que siguen las especies durante la evolución de la descarga.

Publicaciones

Publicaciones

Aunque una parte importante del contenido de este trabajo no ha sido publicado, algunas de las ideas y figuras aparecen en la siguiente lista de publicaciones:

1. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Multi-species simulation of Trichel pulses in oxygen. *XXI Europhys. Conf. At. Mol. Phys. Ioniz. Gases* (2012).
2. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. 3D Multispecies Simulation in Low Pressure Oxygen. *XXXI International Conference on Phenomena in Ionized Gases* (2013).
3. Pontiga F., Durán-Olivencia, F. J. & Castellanos, A. Plasma-chemical simulation of negative corona near the inception voltaje. *66th Annual Gaseous Electronics Conference* (2013).
4. Durán-Olivencia, F. J. Modeling and diagnostics of a multi-streamer surface DBD based jet for biomedical applications. *COST Action, ECOST-STSM-MP1101-090114-040765* (2014).
5. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Numerical Modelling of Electrical Discharges. *J. Phys. Conf. Ser.* **490**, 012209 (2014).
6. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Multi-Species Simulation of Negative Corona Pulses in Oxygen. *42nd Advanced Problems in Mechanics* (2014).
7. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Multi-species simulation of Trichel pulses in oxygen. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47**, 415203 (2014).
8. Pontiga F., Durán-Olivencia, F. J. & Castellanos, A. Plasma Chemistry Simulation of Trichel Pulses in Oxygen. *Tlemcen* (2014)

Agradecimientos

Agradecimientos

La elaboración de una Tesis es un **proceso** (*en el sentido Kafkiano*) en el que intervienen una cantidad importante de personas, con una experiencia y formación aún más importante. Es, por tanto, un trabajo no solo de una persona sino de un grupo. Así que es justo reconocer el papel de todas y cada una de las personas que han intervenido, directa o indirectamente, en la composición de este *puzzle*.

En primer lugar me gustaría expresar mi más sincero agradecimiento a mis supervisores Francisco Pontiga Romero y Antonio Castellanos Mata. De un lado, por la posibilidad de investigar en un grupo como el de *Electrohidrodinámica y Medios Granulares Cohesivos* (EHD-CGM), y por otra parte por permitir y contribuir a mi desarrollo y madurez intelectual haciéndome participe de la investigación. Así mismo, quiero agradecer a la Junta de Andalucía por el soporte económico (*proyecto de Excelencia*, FQM-4983), sin el cual este trabajo no hubiera sido posible.

Al margen del agradecimiento y admiración profesional, también me gustaría mostrar mi agradecimiento, en el ámbito personal, a mis supervisores Francisco Pontiga Romero y Antonio Castellanos Mata. Sus consejos, ayuda y comprensión en *determinadas circunstancias* han sido cruciales en el desarrollo de esta Tesis. Además del apoyo que siempre me han mostrado, también han sido una fuente de motivación constante en el desarrollo de este trabajo. Estaré siempre en deuda con ellos.

También me gustaría mostrar un especial agradecimiento a Milan Simek, y la institución que representa: *Institute of Plasma Physics AS CR, v.v.i.* (IPP). Por su *calurosa forma* de acogerme, por la dedicación que me prestó y por todo el tiempo que *le robé*, y que siempre estuvo dispuesto a concederme amablemente. Desde luego, la oportunidad que me dieron la Universidad de Sevilla, los fondos europeos (*COST Action*, ECOST-STSM-MP1101-090114-040765) y el IPP para realizar las diferentes estancias en las instalaciones del IPP a cargo de Milan Simek, para mí supusieron realizar un sueño. Por lo que no tengo palabras para reflejar el agradecimiento de aquella etapa.

Antes de agradecer la contribución de otras personas a este trabajo, me gustaría reconocer el papel de mi hermano, Miguel Ángel Durán Olivencia. Él ha sido y es una fuente de inspiración, y con él he podido discutir muchos de los detalles teóricos y matemáticos de este trabajo. Como suele ocurrir con la familia nunca se está en deuda con ellos.

Agradecimientos

El hecho de trabajar en un grupo como el de EHD-CGM me ha permitido colaborar con otras personas, quienes han desempeñado también un papel crucial en el desarrollo de este trabajo (directa o indirectamente). A José Manuel Valverde Millán le estoy especialmente agradecido por todo su apoyo, su paciencia en el tratamiento de datos y su espíritu. Gracias a él he comprendido por qué a las plantas les gusta la música. Además, siempre ha tenido buenas palabras conmigo, mostrándome su interés en ayudarme y aconsejándome sobre decisiones futuras. También me gustaría agradecer la complicidad y apoyo de mis *compañeros de sufrimiento*: Juan Jesús Arcenegui Troya y Francisco Ruiz Botello. Pablo García Sánchez y Antonio Ramos Reyes, están dentro de este grupo aunque sin la etiqueta de *becario*. A Pablo le debo el *bautismo de sangre* en COMSOL, además de soportar estoicamente todo tipo de cuestiones surgidas en el transcurso de la Tesis. Y, dicho sea de paso, para las que nunca tuvo problema en dejar a un lado lo que estuviera haciendo. Dentro de este grupo de personas con las que he trabajado codo con codo cada día también está Carlos Soria del Hoyo, quién no solo me ha mostrado su apoyo, sino también su decisión de ayudarme cuando me ha hecho falta.

También me gustaría agradecer especialmente a Pedro Ángel Vázquez González, su preocupación y apoyo por mi futuro. Sus más que seguras *buenas palabras* acerca de mi trabajo han permitido que Philippe Traoré y su grupo (Institut PPRIME, Université de Poitiers) confíen en mí para un contrato posdoctoral que empezará en Octubre de este año (2015) (una conexión que espero perdure en el tiempo). Además su afinidad con el mundo numérico, me ha permitido encontrar apoyo y comprensión a la hora de discutir multitud de conceptos sin parecer un *bicho raro*.

Quiero agradecer también a Francisco Guillen González (Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico, Universidad de Sevilla) su disposición a la hora de ayudarme a comprender muchos de los detalles numéricos. Su espíritu, comentarios y consejos han sido toda una motivación en mi intento por aprender más del mundo numérico. Desde luego, me siento en deuda con él.

¿Qué sería de mí sin mis padres? Ellos me han enseñado el valor de la perseverancia, el sacrificio y la determinación. Cosas que sólo se pueden inocular en el contexto de la vida. Sin duda, estos agradecimientos y este trabajo son el resultado de su dedicación y esfuerzo. Del mismo modo que su actitud en la vida, este trabajo no persigue un reconocimiento en sí mismo. Y más bien su único fin es agradecerles todo el esfuerzo realizado, haciéndoles ver que no ha sido en vano.

Por último, de todas las personas que he conocido en el contexto de la Tesis he aprendido algo y probablemente eso esté implícita o explícitamente

Agradecimientos

en este trabajo, así que quiero disculparme con todos aquellos que no he mencionado personalmente.

Francisco José Durán Olivencia

Junio, 2015

Tabla *de* **Contenidos**

Contenidos

Dedicatoria	v
Abstract	vii
Resumen	vii
Prólogo	xi
Publicaciones	xvii
Agradecimientos	xxi
Símbolos	xxxii
Acrónimos y Abreviaturas	xxxix
Descargas Eléctricas	1
1.1 Introducción	1
1.2 El efecto avalancha	4
Mecanismo de Townsend—4	
El concepto de <i>streamer</i> —7	
1.3 Modos estacionarios de una descarga DC	10
1.4 Esta Tesis: Objetivos	13
Bibliografía	17
Un Modelo Microscópico	21
2.1 Introducción	21
2.2 Una perspectiva microscópica	22
2.3 La aproximación de acoplamiento débil	26
Colisiones entre partículas en las descargas—27	
Factorización de $f_{\alpha\beta}^{(2)}$ —30	
2.4 La ecuación de Boltzmann	37
2.5 La aproximación fluida	39
2.6 Efectos de superficie	42
Emisión termoiónica—43	
Fotoemisión (efecto fotoeléctrico)—45	
Emisión por efecto campo—45	
Emisión secundaria—46	
Bibliografía	51
El método: FEM	55
3.1 Introducción	55

Contenidos

3.2	El método de los residuos ponderados	57
	Equivalencia entre las ecuaciones diferenciales y la formulación débil—57	
	Formulación Bubnov-Galerkin (método de Galerkin)—59	
	Formulación matricial—59	
3.3	El problema de convección-difusión	62
	Representación estándar—62	
	Representación autoadjunta—65	
	Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG)—66	
3.4	Discretización temporal	69
	El algoritmo—70	
3.5	Precisión y Estabilidad	72
3.6	Un test numérico	76
3.7	Algunas conclusiones finales	83
	Bibliografía	85
	Pulsos de Trichel en O₂ _____	89
4.1	Introducción	90
4.2	Formulación del problema	93
	Construcción de un modelo químico consistente—93	
	Descripción multifluida: una cuestión de escalas—100	
	Ecuaciones fluidas. Aproximaciones—102	
	Efectos de superficie. Interacción descarga-electrodo—104	
4.3	Descripción del modelo	106
	Sistema de ecuaciones de continuidad—108	
	Condiciones de contorno—110	
	Condiciones iniciales—112	
4.4	Aproximación numérica.	112
4.5	Evolución de los pulsos de Trichel	114
	El primer pulso de Trichel—114	
	Pulsos de Trichel regulares—121	
4.6	Conclusiones	131
	Apéndice	133
	Bibliografía	135
	Conclusiones _____	141

Lista *de*
Símbolos

Símbolos

V	⁽¹⁾ diferencia potencial entre electrodos ⁽²⁾ volumen del sistema
d	distancia entre electrodos
E_0	campo eléctrico externo
i_0	intensidad de corriente inicial debida a la ionización natural
α	⁽¹⁾ primer coeficiente de Townsend (recorrido medio para que el que tiene lugar un proceso de ionización) ⁽²⁾ factor de peso que actúa sobre el término estabilizador en la formulación <i>streamline upwind Petrov-Galerkin</i> ⁽³⁾ (superíndice) *: coeficiente de excitación
N	⁽¹⁾ densidad numérica del medio ⁽²⁾ número total de partículas
n_α	densidad numérica de la especie α
p	presión
γ_{se}	segundo coeficiente de Townsend generalizado
\mathcal{I}	energía a de ionización
\mathcal{W}_0	trabajo de extracción de un electrón en el metal
Θ	función escalón unitario
i_{cat}	intensidad de corriente total en el cátodo
η_2	coeficiente generalizado para la captura electrónica (recorrido medio para que un proceso de este tipo tenga lugar)
η_3	coeficiente generalizado para la recombinación electrónica (recorrido medio para que un proceso de este tipo tenga lugar)
α_{eff}	valor efectivo del primer coeficiente de Townsend ($\alpha_{eff} = \alpha - \eta$, donde $\eta = \eta_2 + \eta_3$)
V_t	tensión umbral para el mecanismo de ruptura o ignición de Townsend
V_A	diferencia de potencial aplicada a los electrodos

Símbolos

	I_c	intensidad de corriente en una descarga tipo corona
(superíndice)	ν	número de especies que componen un sistema de N partículas
	\mathbf{r}^N	vector de posición para un sistema de N partículas
	\mathbf{v}^N	vector velocidad para un sistema de N partículas
	F	función de distribución
	\mathbf{r}_i	vector de posición para la partícula i -ésima
	\mathbf{v}_i	vector velocidad para la partícula i -ésima
	\mathbf{v}_α	(especie cargada) contribución de arrastre debida al campo eléctrico
	\mathbf{a}_i	vector de aceleración total que sufre la partícula i
	c	velocidad de la luz en el vacío
	t	tiempo
	$\frac{D}{Dt}$	derivada sustancial o material
	q_i	carga de la partícula/especie i
	m_i	masa de la partícula i
	ϕ_{ij}	potencial eléctrico entre las partículas i y j
	$f^{(s)}$	función de distribución reducida para s partículas
	\mathbf{E}	campo eléctrico
	\mathbf{B}	campo magnético
(superíndice)	(ext)	referido a los campos aplicados externamente a un sistema de partículas cargadas
	f_α	función de distribución reducida para una partícula de la especie α
	$f_{\alpha\beta}$	función de distribución por pareja para las especies α y β .
	$f_{\alpha\beta\gamma}$	función de distribución para una terna de partículas de las especies α , β y γ
	$g_{\alpha\beta}$	función de correlación por parejas
	r_{12}	distancia relativa entre las partículas 1 y 2
	r_c	radio de correlación
	λ_D	longitud de Debye
	g	parámetro del plasma
	k_B	constante de Boltzmann

T	temperatura
ℓ_H, τ_H	escalas características de la relajación macroscópica: espacial y temporal, respectivamente
ℓ_{mpf}, τ_{mfp}	escalas características de la fase cinética: espacial (recorrido libre medio) y temporal, respectivamente
$\langle \mathbf{E} \rangle$	campo eléctrico medio (promedio en el espacio de las fases) creado por todas las partículas cargadas
$\langle \mathbf{B} \rangle$	campo magnético medio (promedio en el espacio de las fases) creado por todas las partículas cargadas
$\left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right _c$	término de colisión en la ecuación de Boltzmann
\mathbf{J}	vector densidad de corriente macroscópica
σ	sección eficaz de colisión
Ω	ángulo sólido
$\mathbf{v}_{\alpha\beta}$	velocidad relativa entre una partícula de la especie α y otra de la especie β
$\overline{\left. \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right _c}$	promedio temporal del término de colisión de Boltzmann
ℓ_c	escala espacial característica para una colisión binaria
γ	⁽¹⁾ parámetro de gas diluido ⁽²⁾ probabilidad de emisión secundaria por impacto ⁽³⁾ (subíndice) p : factor de eficiencia para los fotoelectrones emitidos en la superficie del cátodo
χ	ángulo de dispersado en una colisión binaria
m_R	masa reducida
ϵ_0	permitividad eléctrica del vacío
b	parámetro de impacto
ν_{en}, ν_{ee}	frecuencias de colisión electrón-partícula neutra (medio) y electrón-electrón, respectivamente
ν_m	frecuencia de colisiones elásticas
\mathbf{u}_α	velocidad media de la especie α
\mathbf{P}_α	tensor de presiones para la especie α
\mathbf{R}_α	fricción neta debida al efecto de las colisiones para la especie α
\mathbf{Q}_α	flujo de energía térmico o flujo de calor
Q_α	término de reacción (ec. de continuidad de la especie

Símbolos

	α)	
$\left(\frac{\partial \mathbb{W}}{\partial t}\right)_{E,\alpha}$		flujo de calor asociado al efecto de las colisiones para la especie α
μ	⁽¹⁾	potencial químico
	⁽²⁾	coeficiente de absorción (radiación) del medio
	⁽³⁾ (subíndice)	α : movilidad de la especie α
ϵ_F		energía de Fermi
ν		frecuencia de la luz
h (\hbar)		constante de Planck ($h/2\pi$)
A_{FN}, B_{FN}		constantes para la relación de Fowler-Nordheim
e_M		electrón en el metal
E_{X^*}		energía del estado excitado que captura el electrón del metal en un proceso de neutralización de Auger
$\Delta\epsilon$		defecto de energía
$E_{X^+-M}(s)$		energía de interacción del ion con la superficie metálica a una distancia s de ésta
$E_{X-M}(s)$		energía de interacción del átomo con la superficie metálica a una distancia s de ésta
	\mathcal{D}	coeficiente de difusión
	\mathbf{n}_s	normal a la superficie (apuntando desde el volumen a la superficie)
(subíndice)	p	Referido a la pared
	Ω	⁽¹⁾ interior del dominio
		⁽²⁾ ángulo sólido definido por un disco de carga (método de los discos) desde el punto del cátodo situado en el eje de simetría
	$\partial\Omega$	frontera del dominio
$\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$		región que encierra el problema
	Γ_D	contorno del tipo Dirichlet
	Γ_N	contorno del tipo Neumann
	w	función arbitraria utilizada para la ponderación en el método de los residuos ponderados (discretización espacial)
	\mathcal{S}	conjunto de funciones (solución) admisibles en la formulación débil del problema

\mathcal{U}	conjunto de variaciones admisibles en la formulación débil del problema
$H^1(\Omega)$	espacio de Sobolev de grado 1 y orden 2
$L^2(\Omega)$ ó $L^2(\Gamma)$	funciones de cuadrado integrable sobre el dominio (Ω) o el contorno (Γ), respectivamente
C^m	funciones de clase m , esto es, con derivada m -ésima continua
\mathcal{S}^h	aproximación de dimensión finita del espacio funcional \mathcal{S}
\mathcal{U}^h	aproximación de dimensión finita del espacio funcional \mathcal{U}
\mathcal{D}^k	espacio de polinomios de grado k
n^h y ω^h	funciones solución y variación/test, respectivamente, definidas en sendos espacios aproximados
M_E	número total de elementos (discretización espacial)
M	número total de nodos
N_i	función de forma asociada al punto i de la malla
\tilde{w}_i	valor nodal (punto i de la malla)
\mathbf{M}	matriz de amortiguamiento (<i>damping matrix</i>)
\mathbf{K}	matriz de rigidez (<i>stiffness matrix</i>)
\mathbf{F}	matriz de carga (<i>load matrix</i>)
h_i	tamaño de la malla en el elemento i
Pe	número de Péclet
ω	función arbitraria utilizada para la ponderación en el método de los residuos ponderados (discretización temporal)
\mathcal{R}	residuo
\mathcal{J}	matriz tangente o Jacobiana
\mathcal{N}	operador (numérico) asociado a la ecuación diferencial en cuestión
G	factor de amplificación
σ	número de Courant
d	número de difusión
ε_D	error de difusión asociado al esquema numérico
ε_Φ	error de dispersión (o error en el fase) asociado al

Símbolos

	esquema numérico
ϕ	⁽¹⁾ fase ⁽²⁾ potencial eléctrico
ρ	densidad de carga
τ	vida media de las especies excitadas
Da	número de Damköhler
k_i^d	tasa de reacción para la ionización directa
k_i^p	tasa de reacción para la ionización por pasos
a	función escalón en términos de si la velocidad de la especie en cuestión apunta hacia la superficie de la pared (1) o no (0)
$v_{th,\alpha}$	velocidad térmica de la especie α
δ_k	coeficiente de adsorción de la especie k en la pared/electrodo
I	intensidad de corriente (ec. de Sato)
[]	⁽¹⁾ matrices ⁽²⁾ promedio espacial
{ }	matrices de una columna o vectores

Lista *de*
Acrónimos y Abreviaturas

Acrónimos y Abreviaturas

DC	régimen estacionario de corriente (<i>direct current</i>)
BE	ecuación de Boltzmann
BBGKI	jerarquía de ecuaciones para la función de distribución reducida deducidas por Bogolyubov, Born, Green, y Kirkwood y Yvon.
LTE	equilibrio termodinámico local
FEM	método de los elementos finitos
CN	Crank-Nicholson
BG	representación estándar del FEM (Bubnov-Galerkin)
SUPG	<i>streamline upwind Petrov-Galerkin</i>
FD	diferencias finitas
FCT	<i>flux-corrected transport</i>
ODE	ecuación diferencial ordinaria
BDF	<i>backward difference</i>
EEDF	función de distribución de energía de los electrones
CDR	convección-difusión-reacción
CD	convección-difusión
EDE	ecuación diferencial equivalente
PIC	método de las partículas (<i>particle-in-cell</i>)
ED	ecuación diferencial

Descargas Eléctricas

Descargas Eléctricas

Capítulo

1

“The variety and complexity of the electrical phenomena which occur when matter is present in the electric field are in marked contrast to the simplicity of the phenomena when the ether alone is involved.”

J.J. THOMSON, The Discharge of Electricity Through Gases, 1898.

Contenido

1.1	Introducción	1
1.2	El efecto avalancha	4
	Mecanismo de Townsend—4	
	El concepto de <i>streamer</i> —7	
1.3	Modos estacionarios de una descarga DC	10
1.4	Esta Tesis: Objetivos	13
	Bibliografía	17

1.1 Introducción

Originalmente, el concepto de la **descarga eléctrica** aparece ligado con la descarga de un condensador en un circuito eléctrico. El condensador se introduce separando dos electrodos metálicos e incorporando entre éstos un material dieléctrico (un gas en el caso más simple). En estas condiciones, si la tensión aplicada a los electrodos es lo suficientemente elevada, se produce la ruptura dieléctrica del gas, formándose un nuevo estado en el que el gas está ionizado. Este proceso, en el que un gas inicialmente neutro (que actuaba como aislante) se convierte en conductor, se conoce como **breakdown**, **ruptura** o **ignición**. Cuando esto ocurre, el circuito se cierra y en consecuencia el condensador se descarga. De ahí que el término de descarga se extienda de manera natural a todos aquellos procesos en los que surgen

este tipo de corrientes, derivadas de una etapa de ionización previa.

Actualmente, las descargas eléctricas se consideran una rama más de la física de los **plasmas**. El término “plasma” fue acuñado por Irving Langmuir¹ en 1928 para referirse a la zona cuasi neutra que aparecía detrás de las capas límites formadas en las proximidades de los electrodos^a. Aunque no existe una versión definitiva de la razón que impulsó a Langmuir para adoptar esta terminología, Rogoff² sugiere que la elección estuvo motivada por el significado griego de la palabra, en alusión al carácter moldeable de algo. Es precisamente en este contexto en el que a mediados del siglo XIX se adoptó por primera vez dicha palabra griega. Entonces, el fisiólogo checo Jan Evangelista Purkinje introdujo el término plasma para referirse al fluido remanente tras eliminar todo el material corpuscular de la sangre.

El concepto de plasma en la física abarca las peculiaridades de la **materia ionizada**, motivo por el cual se conoce como el **cuarto estado de la materia**. La presencia de portadores de carga libre hace de los plasmas sistemas conductores (en términos eléctricos), con una fuerte predisposición a la interacción interna y muy susceptibles a la presencia de campos electromagnéticos. La esencia de todas las peculiaridades características de los plasmas puede reducirse a la comprensión de la dinámica de un conjunto de partículas cargadas en el seno de campos electromagnéticos. Sin embargo, el marco teórico necesario para ello manifiesta la complejidad y el carácter interdisciplinar que conlleva afrontar este tipo de fenómenos con un mínimo de rigurosidad.

Aun a día de hoy, después de décadas de investigación las descargas eléctricas, muchas de las cuestiones fundamentales continúan abiertas. Desde luego, una parte importante del esfuerzo realizado históricamente se ha centrado en descifrar aquellos aspectos cualitativos que permiten explicar la taxonomía de las descargas eléctricas. Como resultado de ello, muchas de las características cruciales para entender la evolución espacio-temporal de las descargas empiezan a comprenderse en todas sus facetas. Un elemento fundamental como precursor de la ruptura es el **efecto avalancha** que experimentan los electrones. Este proceso se desarrolla en aquellas zonas donde existe un campo eléctrico relativamente elevado que conduce a un proceso en cadena vía ionización. Habitualmente, la avalancha suele iniciarse a partir de un pequeño número de electrones semillas que aparecen en la región entre electrodos de forma accidental, originados por la radiación

^a “Except near the electrodes, where there are sheaths containing few electrons, the ionized gas contains ions and electrons in about equal numbers, so that the resultant space charge is very small. We shall use the name plasma to describe this region containing balanced charges of ions and electrons.”

cósmica u otra fuente natural. Sin embargo, a fin de obtener unas condiciones iniciales reproducibles, los electrones semillas también pueden crearse artificialmente por medio de fotoelectrones emitidos en el cátodo al irradiar éste con una fuente ultravioleta.

La ruptura o *breakdown* es un fenómeno que esencialmente tiene lugar a partir de un cierto umbral energético (*threshold*). Por este motivo, en aquellas zonas donde el campo eléctrico es elevado y los electrones alcanzan la **energía umbral de ionización** del gas (medio), las propiedades de éste se verán afectadas significativamente. Por otra parte, en aquellas regiones donde no se alcanza dicho umbral energético, el estado del medio no variará de manera notable, al menos en primera instancia. A posteriori, estas zonas desempeñarán un papel fundamental como sumidero electrónico junto con el propio electrodo (ánodo). El caso de los gases electronegativos es especialmente interesante dado que la carga iónica negativa acumulada y el barrido de ésta son dos de los parámetros que condicionan el desarrollo de nuevos frentes de avalancha en las proximidades del electrodo.

El proceso realimentado o multiplicativo de las avalanchas desencadenado por la presencia de un campo eléctrico externo que acelera los electrones se conoce como **mecanismo de Townsend**. Este mecanismo de ignición permite explicar el desarrollo de las descargas principalmente a presiones bajas y moderadas. En el caso de descargas automantenidas debe existir además una realimentación entre los electrones secundarios emitidos por el cátodo, los iones positivos y el campo eléctrico.

A presiones superiores (del orden de la atmosférica) es necesario introducir un efecto añadido que describa la aparición de canales de ionización conocidos como *streamers*, que pueden evolucionar para convertirse en *leaders* y llegar incluso a comunicar ambos electrodos (*sparks*). La **distorsión del campo local** creada por la propia descarga juega un papel fundamental en el desarrollo de los *streamers*, aunque también hay implicados otros factores en la realimentación como la **ionización por pasos** o la propia radiación emitida por el *streamer*.

El concepto de *streamer* junto con el mecanismo de Townsend y la distorsión del campo eléctrico representan los principales procesos utilizados para explicar la evolución de las descargas. Este último puede llegar a ser determinante en el efecto de multiplicación por avalancha por medio de la carga espacial acumulada en el transcurso de la descarga. Sin embargo, la acción combinada del campo eléctrico externo junto con el campo creado por el resto de partículas cargadas constituye el principal problema, aunque no el único, cuando se requiere una descripción cuantitativa. Este último campo depende de las posiciones de las partículas cargadas en cualquier punto del espacio, por lo que puede variar rápidamente en el espacio y tiempo. Como

resultado de ello, se obtienen un conjunto de ecuaciones de movimiento que forman un complejo sistema de ecuaciones no lineales fuertemente acopladas entre sí.

En este contexto, la aproximación fluida (§2.5) se ha utilizado históricamente para dar una descripción de grano grueso que permitiese transformar las ecuaciones en un conjunto “más asequible”. No obstante, algunas de las hipótesis implícitas en el tratamiento fluido requieren cierta cautela y pueden fallar completamente en según qué zonas de la descarga (esta discusión se seguirá en más detalle en §4.2).

1.2 El efecto avalancha

Mecanismo de Townsend

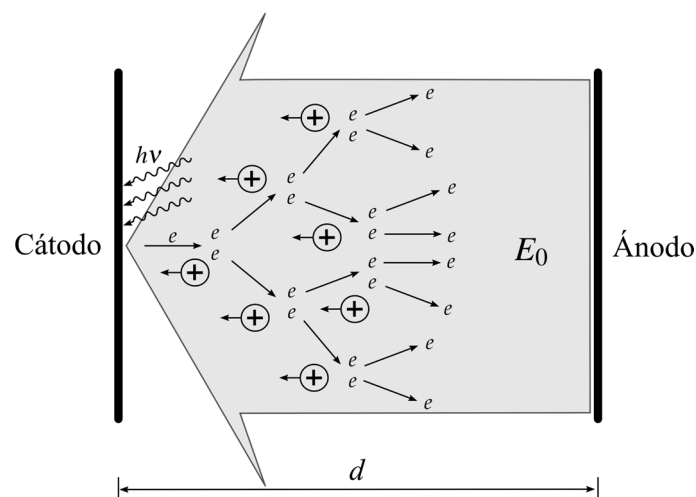


Fig. 1.2-1: Esquema ilustrativo de la evolución de la avalancha electrónica en un campo uniforme donde la carga espacial no llega a distorsionar el campo externo, E_0 .

Consideremos dos electrodos planos separados por una distancia d y entre los que se aplica una diferencia de potencial V . Si el cátodo se expone a radiación ultravioleta de frecuencia adecuada, la emisión de fotoelectrones por el metal, generará una corriente inicial, i_0 , asociada con el arrastre de éstos hacia el ánodo. El desplazamiento de este primer frente electrónico puede generar nuevos electrones por medio de la ionización de las moléculas del gas (véase Fig. 1.2-1). El **primer coeficiente de Townsend, α** , caracteriza este proceso de ionización por avalancha indicando el número de electrones producidos (vía ionización directa) por unidad de longitud, $\partial_x n_e = \alpha n_e$. En la literatura³⁻⁵ suele encontrarse en términos reducidos, bien como α/p o α/N donde p y N representa la presión y densidad del medio

respectivamente.

En cada proceso de ionización, además de un nuevo electrón se genera un ion positivo que migrará hacia el cátodo. Como resultado de ello, por cada electrón primario que abandona en el cátodo se recolectan $(e^{\alpha d} - 1)$ iones positivos en dicho electrodo.

Por otra parte, el **segundo coeficiente generalizado de Townsend**, γ_{se} , describe los diferentes procesos implicados en la emisión secundaria de electrones en la superficie del cátodo, tales como:

1. Emisión secundaria debido al impacto iónico en el cátodo (proceso de neutralización de Auger⁶).
2. Emisión de fotoelectrones en el cátodo debido al efecto de la radiación creada en el transcurso de la descarga (fotoemisión).
3. Emisión de electrones secundarios asociados al impacto de estados excitados y metaestables sobre la pared del cátodo (proceso de desexcitación de Auger⁶).

A menudo suele utilizarse una relación experimental³ (con una precisión en torno al 50% en superficies metálicas “limpias”) como primera aproximación de este coeficiente,

$$\gamma_{se} \approx 0.016(\mathcal{I} - 2W_0)\Theta(\mathcal{I} - 2W_0), \quad \langle 1.2.1 \rangle$$

donde \mathcal{I} representa la energía de ionización del medio, W_0 es el trabajo de extracción de un electrón y $\Theta(\mathcal{I} - 2W_0)$ describe la función escalón unitario. Típicamente los valores de γ_{se} suelen estar comprendidos en un rango⁷ entre 0.01 y 0.1.

El efecto de la avalancha inicial junto con las posibles avalanchas secundarias conduce a una contribución electrónica a la corriente total en el cátodo de acuerdo con la relación:

$$i_{cat} = i_0 + i_{cat}\gamma_{se}(e^{\alpha d} - 1), \quad \langle 1.2.2 \rangle$$

donde i_0 representa la contribución de los fotoelectrones primarios y el segundo término, $i_{cat}\gamma_{se}(e^{\alpha d} - 1)$, justifica la contribución debida a la emisión secundaria en el cátodo. La corriente electrónica en el ánodo coincide con la corriente externa del circuito, dada la ausencia de contribución iónica en dicho electrodo. En tal caso, la corriente total en el ánodo resulta, $i = i_{cat}e^{\alpha d}$, lo que conduce a la conocida **fórmula de Townsend**:

$$i = \frac{i_0 e^{\alpha d}}{1 - \gamma_{se}(e^{\alpha d} - 1)}. \quad \langle 1.2.3 \rangle$$

La validez de esta expresión está condicionada a que las densidades de electrones e iones positivos sean suficientemente bajas, de forma que los

procesos de recombinación electrón-ion puedan despreciarse. En estas circunstancias, los electrodos constituyen las principales vías para la eliminación de la carga. No obstante, a medida que la intensidad de corriente aumenta, la recombinación irá ganando importancia, y puede llegar a ser un factor limitante en el desarrollo de las sucesivas avalanchas secundarias. Para incorporar el efecto de procesos como la captura, η_2 , o recombinación electrónica, η_3 , en la relación <1.2.3> basta considerar un valor efectivo para el primer coeficiente de Townsend $\alpha_{eff} = \alpha - \eta$, siendo $\eta = \eta_2 + \eta_3$.

La expresión <1.2.3> proporciona el valor de la corriente para una presión, p , y campo eléctrico, E/N , dados, siempre que d sea menor que un cierto valor crítico, d_t . Este último queda definido por la condición

$$1 - \gamma_{se}(e^{\alpha d} - 1) = 0. \quad \langle 1.2.4 \rangle$$

Puede parecer que en el proceso límite con d tendiendo a d_t , el valor de la corriente crece indefinidamente. Sin embargo, en la práctica, esta aproximación está limitada por la estabilidad de la propia fuente de alimentación. En un caso particular, fijada la distancia entre electrodos, d , queda determinado el valor del campo externo E_0 , que a su vez fija el valor de las cantidades α y γ_{se} . Siguiendo esta cadena de relaciones entre $\{V, d\} \rightarrow E_0 \rightarrow \alpha$ (tomando γ_{se} constante), la tensión umbral V_t que satisface la relación <1.2.4> es aquella para la cual

$$\alpha_t = \frac{1}{d} \ln \left(1 + \frac{1}{\gamma_{se}} \right). \quad \langle 1.2.5 \rangle$$

Así la tensión umbral conduce a un valor del primer coeficiente de Townsend (relacionado con la tasa de ionización) para el que se cumple que $\mu = \gamma_{se}(e^{\alpha d} - 1) = 1$. Es decir, dado que por cada electrón primario que abandona el cátodo se obtienen $(e^{\alpha d} - 1)$ iones que impactan sobre dicho electrodo, la condición anterior (ec. <1.2.4> y/o <1.2.5>) expresa que por cada electrón del frente primario se produce un electrón por emisión secundaria en el cátodo. Por este motivo <1.2.4> no solo refleja la condición para el **mecanismo de ruptura** o **ignición de Townsend**, sino que define la transición entre descargas automantenidas, $\mu > 1$, y no automantenidas $\mu < 1$.

Tanto en modelos teóricos como numéricos, el valor α suele ajustarse por medio de la relación experimental propuesta por Townsend^{8,3,7},

$$\frac{\alpha}{p} = A e^{-\frac{Bp}{E}}, \quad \langle 1.2.6 \rangle$$

donde A y B son constantes de ajuste experimentales. En este caso <1.2.6> sustituida sobre <1.2.5> conduce a una relación para la tensión umbral,

$$V_t = \frac{B(pd)}{C + \ln pd}, \quad \frac{E_t}{p} = \frac{B}{C + \ln pd}, \quad \langle 1.2.7 \rangle$$

donde

$$C = \ln \frac{A}{\ln \left(1 + \frac{1}{\gamma_{se}} \right)}.$$

Las curvas $V_t(pd)$ descritas por la relación $\langle 1.2.7 \rangle$ se conocen como **curvas de Paschen**. Los valores para constantes A y B pueden deducirse a partir del ajuste de $\langle 1.2.6 \rangle$ para el coeficiente de ionización^{8,3,7}. En Fig. 1.2-2 se ha representado el caso particular del oxígeno a $T = 293$ K.

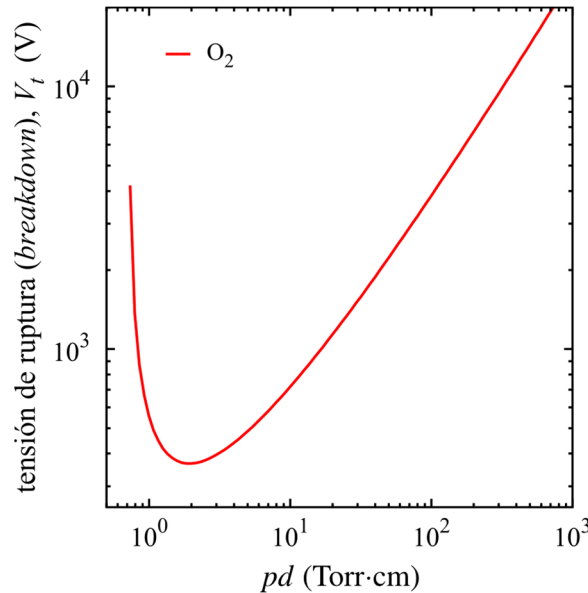


Fig. 1.2-2: Curva de Paschen para el O_2 a 293 K (el valor de las constantes se ha tomado de Lieberman y Lichtenberg⁷).

El concepto de *streamer*

El mecanismo de Townsend describe apropiadamente una descarga estacionaria en el rango de presiones medias y bajas ($pd < 200$ Torr · cm), dentro de un sobrevoltaje moderado. Incluyendo el efecto de la distorsión del campo eléctrico en las proximidades del cátodo es posible explicar, incluso, la transición desde la descarga oscura de Townsend hacia una descarga de tipo **glow** (véase §1.3). Sin embargo cuando los valores de pd y el sobrevoltaje son elevados, el desarrollo de la descarga es mucho más rápido que el predicho por el efecto de sucesivas avalanchas iniciadas por medio de las emisión secundaria en el cátodo. Es decir, no hay tiempo suficiente para la multiplicación por avalancha desde el cátodo, incluso cuando se considera la

fotoemisión.

En este contexto surge el concepto de *streamer*⁸⁻¹⁰. El *streamer* representa un estrecho canal ionizado que aparece entre los electrodos como consecuencia de una primera avalancha muy intensa. Este es el canal que “seguirá” la carga positiva hacia el ánodo. A diferencia del mecanismo de Townsend, vinculado a la emisión secundaria en el cátodo, el concepto de *streamer* explica precisamente aquella región *pd* para la cual el desarrollo de la descarga es independiente del material usado en el cátodo (la aparición de *streamers* puede tener lugar incluso cuando se emplean electrodos de aleaciones con coeficientes de emisión secundaria del orden de, $\gamma_{se} \sim 10^{-8}$). En este caso los electrones secundarios que inician las sucesivas avalanchas se deben a los fotones que caen dentro de este canal ionizado. Estos fotones son emitidos por la nube de átomos excitados que resultan tanto de la primera como de las sucesivas avalanchas secundarias. La distorsión del campo eléctrico local en el frente del *streamer*, a diferencia de la situación en el cátodo, no llega a generar una región de ionización lo suficientemente extensa. Por este motivo, el papel de la interacción entre el frente del *streamer* y la radiación generada por la propia descarga es crucial. Por tanto, ahora el ciclo de realimentación positiva se construye por medio de la interacción entre la distorsión del campo eléctrico local, estados excitados y procesos del tipo ionización por pasos en los que electrones de baja energía resultantes de la ionización desempeñan un papel fundamental (el proceso de ionización por pasos puede llegar a ser entre 10^3 y 10^4 veces más rápido que la ionización directa, véase §4.2).

La transición desde la avalancha al *streamer* ocurre cuando el campo eléctrico local se hace comparable al campo eléctrico impuesto externamente

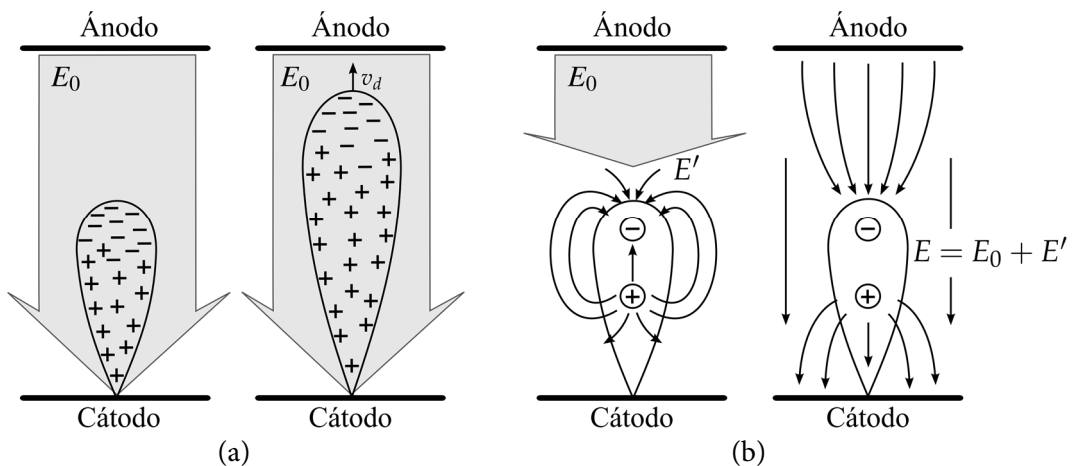


Fig. 1.2-3: (a) Evolución de la descarga entre electrodos. (b) Distorsión del campo eléctrico en la avalancha.

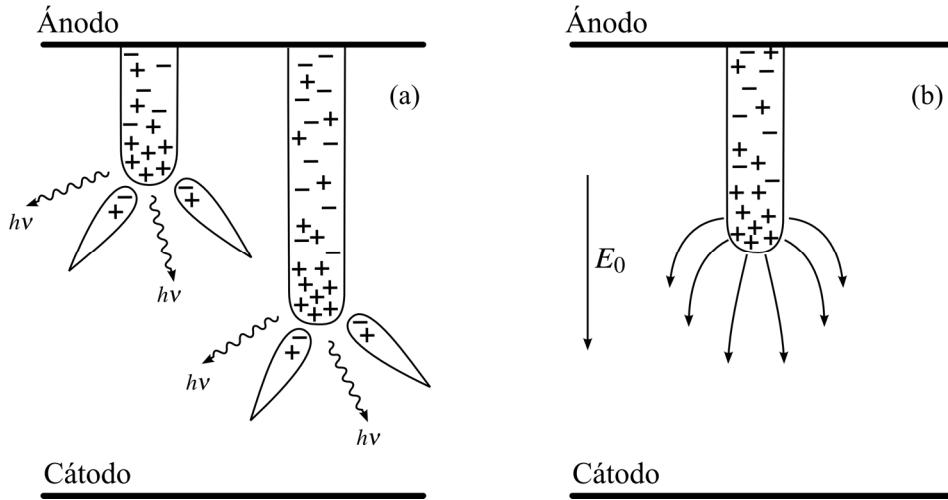


Fig. 1.2-4: Esquema representativo de la evolución de un *streamer* positivo: (a) Propagación del *streamer* vía fotoionización. (b) Distorsión del campo eléctrico en las proximidades del frente del *streamer*.

(véase Fig. 1.2-3). Si la distancia entre electrodos es relativamente corta, esta transición solo ocurre en las proximidades del ánodo. Este tipo de *streamers* que crecen en la dirección del cátodo se conocen como ***streamers dirigidos al cátodo (cathode-directed streamers)*** o ***streamers positivos***. Cuando la separación entre electrodos y el sobrevoltaje son suficientemente grandes, el *streamer* puede ocurrir lejos del ánodo. Estos *streamers* se conocen como

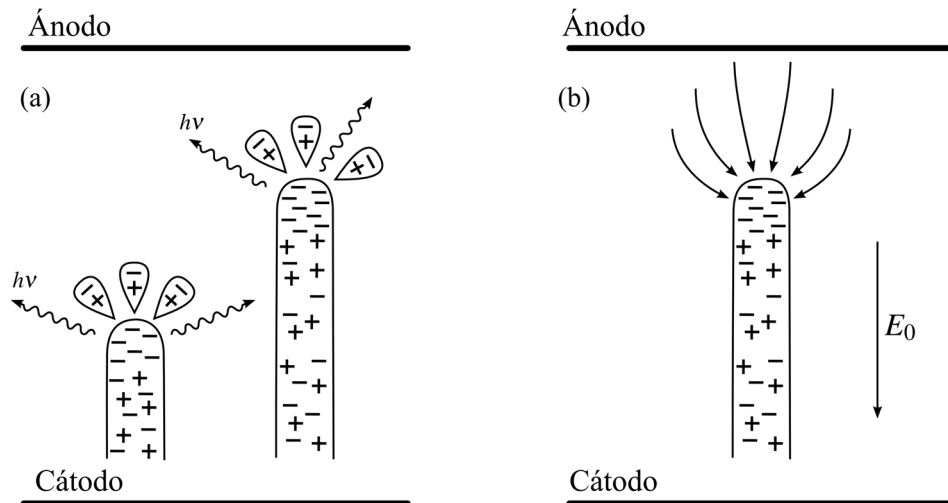


Fig. 1.2-5: Esquema representativo de la evolución de un *streamer* negativo: (a) Propagación del *streamer*. (b) Distorsión de campo eléctrico en las proximidades del frente del *streamer*.

streamers dirigidos al ánodo (anode-directed streamers) o streamers negativos.

Un esquema representativo del mecanismo de formación del *streamer* dirigido hacia el cátodo se muestra en Fig. 1.2-4, donde se ilustra el papel la fotoionización en las proximidades del frente del *streamer* como precursor de las avalanchas sucesivas. El desplazamiento de los electrones secundarios hacia el interior del canal (región cuasineutra) deja tras de sí un nuevo frente de iones. Este proceso muestra que la velocidad *anómala*¹¹ ($\sim 10^8$ cm/s) con la que se desplaza el frente iónico en el *streamer* no responde a un verdadero arrastre de los iones, sino a una *pseudo transferencia de carga* motivada por el desplazamiento de los electrones secundarios hacia el interior del canal cuasineutro que queda detrás del frente del *streamer*.

En el caso de los *streamers* dirigidos hacia el ánodo (véase Fig. 1.2-5), el mecanismo de crecimiento es similar al anterior pero ahora los electrones situados en el frente de la avalancha van neutralizando la estela de iones positivos que van dejando las avalanchas secundarias. A diferencia de los *streamers* positivos, las avalanchas secundarias pueden iniciarse tanto por la fotoionización como por propio movimiento de los electrones en el frente de la avalancha primaria.

1.3 Modos estacionarios de una descarga DC

La condición <1.2.4> marca el límite para que la descarga sea automantenida. Formalmente, $V = V_t$, conduce a una corriente que crece indefinidamente,

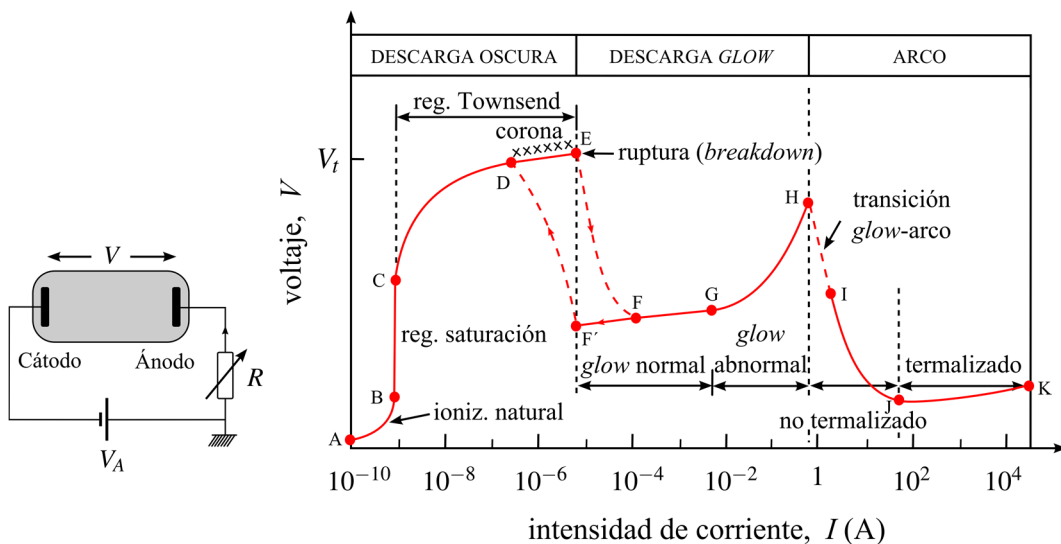


Fig. 1.3-1: Característica $V - I$ en una descarga DC^{3,12,13}. El punto de operación de la descarga viene dado por el corte con la característica de la línea de carga, $V = V_A - IR$.

sin embargo en la práctica el circuito real siempre introduce una resistencia, que junto con la potencia máxima que la fuente puede suministrar limitan la magnitud máxima de la corriente.

En la Fig. 1.3-1 se muestran los modos estacionarios de operación de una descarga DC^{3,12,13} en la que podemos distinguir las siguientes fases:

Ionización natural del medio (A-B): La región de la Fig. 1.3-1 comprendida entre A-B se debe esencialmente a la ionización accidental producida por la **radiación de fondo**. Esta radiación en general proviene de la radiación cósmica, la exposición a un entorno con fuentes radiactivas o cualquier otro tipo de fuente con capacidad de producir un mínimo grado de ionización en el medio. El papel del campo eléctrico en esta región se limita al arrastre de electrones e iones, provocando una corriente neta no nula.

Régimen de saturación (B-C): Si la tensión aplicada entre los electrodos es suficientemente elevada, toda la carga producida en el volumen por medio de fuentes aleatorias puede ser arrastrada hacia los electrodos en un tiempo inferior al requerido para la producción de nuevos portadores. En este caso se habla de **corriente de saturación**, que es independiente de la tensión aplicada.

Descarga Townsend (C-D): Esta región, descrita en la Fig. 1.3-1 en el intervalo definido por los puntos C-D, caracteriza un intervalo de

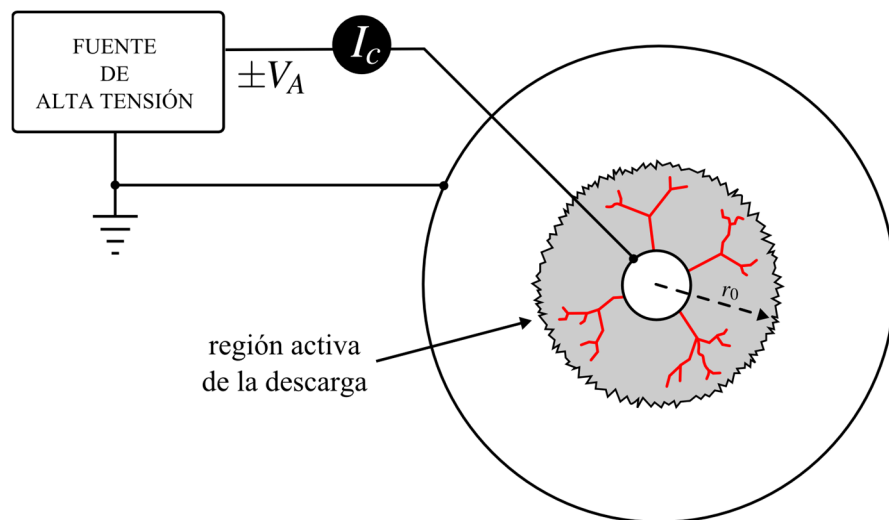


Fig. 1.3-2: Representación esquemática de la descarga corona producida entre un hilo y un cilindro. Se ilustra la activación simultánea de múltiples descargas (*brush discharge*) en distintos puntos del hilo, formando *streamers* dentro de la región donde el campo eléctrico es más intenso.

tensiones en el que la descarga evoluciona por medio del mecanismo de Townsend. Los electrones primarios producidos por la radiación de fondo junto al cátodo dan lugar a $\gamma_{se}(e^{\alpha d} - 1)$ electrones secundarios (vía impacto iónico). La relación (1.2.4) proporciona el umbral de tensión a partir del cual el número de electrones secundarios en el cátodo es igual al de electrones primarios. Debido a la dependencia de α con E (ec. (1.2.6)), incluso ligeras desviaciones de la tensión umbral producen valores de corriente prácticamente asintóticos.

Descarga corona (D-E): Este tipo de descargas tiene lugar en regiones donde el campo eléctrico es muy intenso debido a la reducida dimensión del radio de curvatura del electrodo, este es el caso de puntas, hilos o el borde de una cuchilla. Estrictamente hablando, una descarga corona puede considerarse de tipo *glow*, y por ello visible al ojo humano, cuando resultan corrientes suficientemente altas. El concepto de *brush discharge* (algo así como descarga de tipo pincel) está relacionado con esto último, en alusión a la activación simultánea de múltiples descargas coronas en presencia de un campo eléctrico no uniforme (véase Fig. 1.3-2).

Descarga glow-régimen subnormal (E-F): La principal característica de este régimen es la aparición de una densidad de carga espacial positiva en las proximidades del cátodo debido a la diferencia de movilidades entre

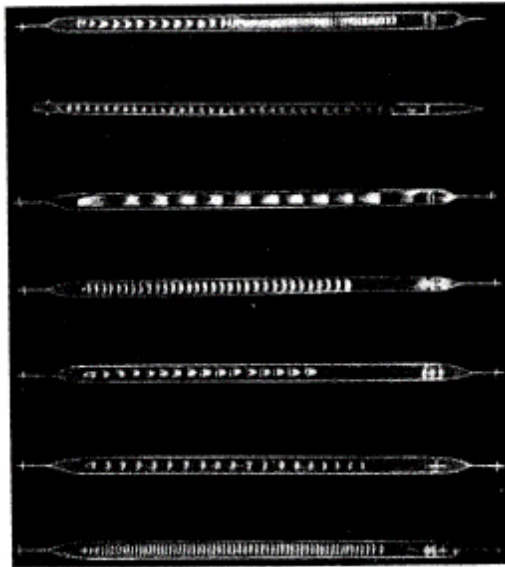


Fig. 1.3-3: (Imagen tomada de Raizer³) Instantánea de los patrones espacio-temporales de luminosidad (*striations*), que aparecen en descargas tipo *glow*. La formación de estos patrones es una consecuencia del refuerzo del campo eléctrico en el cátodo debido al exceso de carga positiva en las proximidades de dicho electrodo.

iones y electrones. Este exceso de carga positiva refuerza el campo en las inmediaciones del electrodo, con la consecuente caída de potencial. Esta región donde E se refuerza se conoce como *cathode fall*. En estas circunstancias conviene redefinir el factor de multiplicación de la avalancha por el término

$$e^{\int_0^d \alpha(x) dx},$$

donde se contempla la variación espacial de α por medio de la dependencia con el campo eléctrico. A menudo este régimen conduce a inestabilidades que originan la formación de patrones espacio-temporales (véase Fig. 1.3-3).

Si la fuente de alimentación tiene una resistencia interna lo suficientemente pequeña, la transición E-F (entre el régimen de descarga oscura de Townsend y descarga tipo *glow*) puede ocurrir de un modo discontinuo. Esta posibilidad se ha representado en Fig. 1.3-1 por medio de líneas discontinuas.

Descarga *glow*–régimen normal (F-G): En este intervalo, el crecimiento de la corriente está relacionado con la extensión de la descarga sobre todo el electrodo mientras se mantiene la densidad de corriente. Lógicamente, el intervalo de operación de este modo depende de la extensión y forma del electrodo en cuestión.

Descarga *glow*–régimen abnormal (G-H): Una vez que el electrodo queda completamente cubierto por la descarga solo es posible aumentar la corriente aumentando la tensión aplicada. Con ello aumenta la región donde el campo eléctrico se ve reforzado, y se favorece que los electrones secundarios recorran una región con una mayor caída de potencial. De este modo se consigue una mayor ionización.

Descarga de tipo arco (H-K): La transición desde una descarga tipo *glow* a un **arco** está marcada por la aparición de toda una gamma de fenómenos que dejan de ser despreciables, tales como: el calentamiento del gas o la emisión secundaria por efecto termoiónico, entre otros. De hecho esta última se hace dominante sobre emisión secundaria por impacto iónico. Como resultado de ello se mejora la eficiencia de la emisión secundaria y con ello el poder de ionización, lo que finalmente se traduce en una nueva caída de potencial.

1.4 Esta Tesis: Objetivos

Aunque existe una bibliografía relativamente extensa a propósito de las descargas eléctricas, la mayor parte de la misma tiene, o bien un enfoque

experimental, o bien heurístico basado en la esperanza de que las ecuaciones macroscópicas sirvan para explicar la evolución de las descargas. Una parte importante de este esfuerzo se ha centrado en los modos estacionarios. No obstante, aunque las situaciones transitorias llevan estudiándose algunas décadas, más intensamente conforme aumentaba la potencia de cálculo de los ordenadores, aún continúan siendo un campo relativamente poco explorado por varias razones:

1. La dificultad que supone abordar un esquema consistente que describa la cinética química del problema en cuestión (una discusión detallada para el caso del O_2 se sigue en §4.2). A menudo este tipo de problemas se resuelve usando gases con una “actividad” relativamente baja, como es el caso de los gases nobles (por ejemplo, el argón) o bien otros sobre los que se han trabajado extensamente por su interés práctico, como el oxígeno.
2. El cálculo de las tasas de reacción y coeficientes de transporte conlleva una dificultad añadida. Cuando se obtienen a partir de resultados experimentales, éstos suelen determinarse en condiciones de homogeneidad y uniformidad. Este problema suele resolverse por medio de una *aproximación de equilibrio local* dentro de lo que se conoce como *régimen hidrodinámico*. Sin embargo, como veremos en el capítulo 2, esta condición de equilibrio falla en presencia de fuertes gradientes o frentes de choque. Este tipo de situaciones surgen en el transitorio de una descarga corona en la transición desde una descarga oscura de Townsend a una descarga tipo *glow* (§3.6 y/o §4.5). Por otra parte, cuando los resultados provienen de simulaciones numéricas, se resuelve la ecuación de Boltzmann (BE) en condiciones de homogeneidad y en régimen estacionario. Una hipótesis frecuente en la resolución numérica de la BE es la denominada *aproximación de dos términos*, según la cual se presupone que el efecto del campo eléctrico sobre la función de distribución de energía genera una ligera anisotropía sobre la situación de equilibrio. Por este motivo se admite un desarrollo de primer orden sobre la función de distribución de energía de los electrones (EEDF). Por otra parte, la condición de homogeneidad elimina el término de colisión de Vlasov, debido a que suele ser más pequeño que el término de colisión de Boltzmann. Sin embargo, puede darse la circunstancia de que sean comparables cuando el arrastre es prácticamente nulo y existen fuerzas de largo alcance, como las de Coulomb (retomaremos esta discusión en capítulo 2). Esto significa que la BE puede llegar a fallar drásticamente en ciertas regiones de la descarga.
3. La idea de utilizar una perspectiva microscópica (capítulo 2) conduce

a un planteamiento basado en la jerarquía BBGKI. El uso de funciones de distribución reducidas supone emplear algún tipo de relación que permita truncar la cadena de ecuaciones entre las funciones de distribución reducidas (normalmente de acuerdo con el *principio de debilitamiento de las correlaciones*). Aun cuando es posible reducir el problema a la función de distribución de una sola partícula de la especie en cuestión, es difícil establecer una conexión con las magnitudes macroscópicas medibles. Esta conexión la proporciona la aproximación fluida, basada en el desarrollo en momentos o método Grad (una discusión de las ecuaciones fluidas y sus principales aproximaciones en el contexto de las descargas se verá en §2.5). No obstante, surge nuevamente una cadena infinita de ecuaciones vinculadas a las variables macroscópicas: densidad, momento, energía, flujo energía, etc. Este proceso requiere nuevamente algún tipo de relación fenomenológica que permita cerrar el sistema de ecuaciones, por lo que se recurre a diversas aproximaciones como la condición de adiabaticidad, el carácter isoterma, etc. Como resultado de ello, se obtienen diferentes aproximaciones, tales como la aproximación de plasma frío (*cold plasma*), templado (*warm plasma*), etc. Aunque se da la circunstancia de que en algunas de estas aproximaciones es posible establecer unos límites bien definidos, no ocurre así con carácter general. No obstante, es posible anticipar ciertas *líneas rojas* sobre la base de las aproximaciones realizadas en las funciones de distribución reducidas.

4. El carácter secular de los coeficientes de un desarrollo perturbativo, tal y como se hace para la EEDF en la resolución de la BE o en el caso de las funciones de distribución reducidas previas a las ecuaciones fluidas, puede llegar a introducir fenómenos de *crecimiento no acotado* en el estudio de tiempo largos tales como el régimen cinético o hidrodinámico (se retomará esta discusión en §2.3).
5. A tiempos largos, la dinámica de la descarga puede llegar a estar completamente condicionada por la dinámica fluida del gas de fondo y su interacción con la descarga.
6. El efecto de la radiación sobre la dinámica de las especies y la importancia de los estados excitados en el desarrollo de *streamers*, así como en multitud de facetas de la descarga, refleja la importancia de incorporar una ecuación de transferencia para los estados radiativos. La importancia práctica de incorporar el efecto de la radiación, aun cuando no desempeñe un papel crucial en la descarga, radica en las posibilidades que ofrecen técnicas avanzadas de espectrofotometría de emisión para obtener información no *invasiva* del desarrollo de la

descarga.

7. La interacción del plasma con la superficie supone todo un reto incluso en los casos más sencillos. En la inmensa mayoría de simulaciones a nivel de volumen, el tratamiento de interacción descarga/plasma/radiación-superficie se limita a un conjunto elemental de procesos basados en la neutralización y desexcitación (una discusión detallada de los principales mecanismos considerados en el contexto de las descargas puede verse en §2.6).

Conforme a las dificultades que plantea una descripción microscópica consistente, los objetivos de esta Tesis pueden resumirse en los siguientes puntos:

1. Plantear un modelo microscópico consistente que describa el régimen transitorio de la descarga corona en oxígeno (incluyendo radicales, estados excitados, estados metaestables, estados vibracionales, electrones, iones, especies neutras, etc). Este tipo de modelado ofrece una descripción no solo microscópica sino también multiespecie que revela el papel de cada una de éstas en según qué etapa de la descarga (capítulos 2 y 4).
2. Definir un esquema numérico basado en elementos finitos (FEM) para simular la descarga. Debido a las inestabilidades asociadas a los problemas de convección dominante en la formulación estándar, se utilizaran esquemas de tipo Petrov-Galerkin (§3.3), donde el espacio de soluciones no coincide con el espacio de las funciones *test* (o funciones peso). Así mismo, se aprovecha la discretización temporal para estabilizar el esquema en regiones de reacción dominante (§3.4-§3.6).
3. Definir una formulación consistente para los procesos superficiales en el marco de una descripción de Langmuir-Hinshelwood bajo una aproximación de campo medio. De esta forma todas las especies adsorbidas se consideran distribuidas aleatoriamente en la superficie y se consigue prescindir de la interacción con los estados adsorbentes en la superficie (§2.6 y §4.2-§4.3).

Bibliografía

1. Langmuir, I. Oscillations in Ionized Gases. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **14**, 627–637 (1928).
2. Rogoff, G. L. Special issue on applications of partially ionized plasmas. *IEEE Trans. Plasma Sci.* **19**, 989–990 (1991).
3. Raizer, Y. P. *Gas Discharges Physics*. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991).
4. Fridman, A. *Plasma Chemistry*. (Cambridge University Press, 2008).
5. Fridman, A. & Kennedy, L. A. *Plasma Physics and Engineering*. (CRC Press, 2011).
6. Hagstrum, H. D. Theory of Auger Ejection Electrons of Electrons from Metal by Ions. *Phys. Rev.* **96**, 336–365 (1954).
7. Lieberman, M. A. & Lichtenberg, A. J. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. (John Wiley & Sons, 2005).
8. Meek, J. M. & Craggs, J. D. *Electrical Breakdown of Gases*. (Wiley, 1978).
9. Raether, H. *Electron Avalanches and Breakdown in Gases*. (Butterworth, 1964).
10. Loeb, L. B. *Basic Processes of Gaseous Electronics*. (University of California Press, 1960).
11. Davies, A. J., Davies, C. S. & Evans, C. J. Computer simulation of rapidly developing gaseous discharges. *Proc. Inst. Electr. Eng.* **118**, 816–823 (1971).
12. Druyvesteyn, M. & Penning, F. The Mechanism of Electrical Discharges in Gases of Low Pressure. *Rev. Mod. Phys.* **12**, 87–174 (1940).
13. Roth, J. R. *Industrial Plasma Engineering: Volume 1 - Principles*. **1**, (CRC Press, 1995).

un Modelo
Microscópico

Un Modelo Microscópico

Capítulo

2

“...First the variations in velocity develop majestically, then the equations of state enter on one side, the equations of the central motion on the other; ever higher surges the chaos of formulae. Suddenly, four words sound out: ‘Put $n=5$ ’. The evil demon v (velocity) disappears...”

LUDWIG BOLTZMANN, Vorlesungen über Gastheorie, 1898.

Contenido

2.1	Introducción	21
2.2	Una perspectiva microscópica.	22
2.3	La aproximación de acoplamiento débil	26
	Colisiones entre partículas en las descargas—27	
	Factorización de $f_{\alpha\beta}^{(2)}$ —30	
2.4	La ecuación de Boltzmann	37
2.5	La aproximación fluida	39
2.6	Efectos de superficie	42
	Emisión termoiónica—43	
	Fotoemisión (efecto fotoeléctrico)—45	
	Emisión por efecto campo—45	
	Emisión secundaria—46	
	Bibliografía	51

2.1 Introducción

La descripción microscópica de la evolución temporal de las descargas puede *reducirse* al comportamiento de un conjunto de partículas cargadas en el seno de campos electromagnéticos. Esta Tesis se encuadra dentro de la teoría clásica de transporte¹ (teoría cinética de gases), donde fundamentalmente se

interpreta el plasma como un conjunto de partículas cargadas que interactúan vía colisiones binarias en presencia de campos electromagnéticos. Esto significa que se adopta la ecuación de Boltzmann (BE) para describir la dinámica microscópica de este tipo de sistemas. Aunque la naturaleza de las fuerzas electromagnéticas y el largo alcance de éstas contradicen la hipótesis de interacción de corto alcance implícita en la BE, desde un punto de vista de la teoría de perturbaciones tiene sentido utilizar la BE como aproximación de primer orden. Una amplia gama de los fenómenos asociados a los plasmas pueden explicarse bajo este tipo de aproximaciones. Por el contrario todos aquellos efectos asociados a modos colectivos y con ello relacionados con el carácter de largo alcance de la interacción de Coulomb (como por ejemplo el amortiguamiento de Landau o las inestabilidades en el espacio de velocidades entre otros) quedan fuera del ámbito de este trabajo y requieren una imagen más exacta del sistema (teoría anómala del transporte^{2,3}).

El objetivo de este capítulo es introducir una imagen microscópica de las descargas eléctricas en el ámbito de la teoría cinética para obtener finalmente las ecuaciones macroscópicas que gobiernan la denominada aproximación fluida. Entender el contexto de las aproximaciones que se realizan en la descripción fluida es crucial para resolver algunos problemas numéricos que pueden derivarse de las limitaciones del modelo físico (en §4.2 retomaremos una discusión detallada acerca de cómo interactúan el modelo físico-químico y el numérico, y la necesidad de integrar ambos enfoques para una descripción coherente de las descargas). Es por esto que se presta especial atención al desarrollo e hipótesis implícitas en la descripción fluida a partir de la BE.

El planteamiento que se sigue para este propósito parte del sistema de ecuaciones BBGKI (generalización de la BE, véase §2.2) para llegar propiamente a la BE.

2.2 Una perspectiva microscópica

La descripción de un sistema de N partículas deja de ser una cuestión de la mecánica clásica en tanto $N \rightarrow \infty$, no solo por la dimensión del sistema de ecuaciones a considerar sino también por la imposibilidad práctica de fijar las condiciones iniciales para cada una de las partículas que definen el sistema.

El **estado dinámico** de un sistema aislado de N partículas con Nh grados de libertad ($Nh = 3N$, –en el caso más simple–), entre las que se distinguen

ν especies^a, queda definido completamente por medio de sus correspondientes posiciones y velocidades

$$\mathbf{r}^N \equiv (\mathbf{r}_1^\alpha, \dots, \mathbf{r}_N^\nu), \quad \mathbf{v}^N \equiv (\mathbf{v}_1^\alpha, \dots, \mathbf{v}_N^\nu). \quad \langle 2.2.1 \rangle$$

En el marco de la mecánica clásica^{5,6} la evolución del sistema queda determinada a partir de la trayectoria seguida por éste en el **espacio de las fases**. Cada uno de los puntos de este espacio (ec. $\langle 2.2.1 \rangle$) determina las características energéticas del sistema, y con ello la trayectoria física queda ligada a la evolución energética del mismo. Bajo este enfoque microscópico, la evolución de cualquier propiedad del sistema requiere la solución de las ecuaciones de movimiento de todas las partículas que lo forman. Esta situación no sólo es inverosímil dada la inexactitud con la que pueden especificarse las condiciones iniciales, sino también por la imposibilidad práctica de resolver un sistema de ecuaciones de este tipo^b.

La física estadística^{7,8} salva esta dificultad a través de la **función de distribución**,

$$F(\mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N; t) d\mathbf{r}^N d\mathbf{v}^N, \quad \langle 2.2.2 \rangle$$

a partir de la cual se mide la probabilidad de encontrar el sistema en un elemento infinitesimal de volumen del espacio físico, en torno al punto $(\mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N)$.

En este contexto, cualquier propiedad microscópica, $a(\mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N; \mathbf{r}, t)$, tiene su reflejo en una magnitud macroscópica, $A(\mathbf{r}, t)$, a partir del promedio de a sobre el espacio de fases (véase Fig. 2.2-1)

$$A(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}^N d\mathbf{v}^N a(\mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N; \mathbf{r}, t) F(\mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N; t). \quad \langle 2.2.3 \rangle$$

Por tanto en una descripción estadística (clásica), el **estado** del sistema queda completamente caracterizado por medio de la función de distribución, F .

En concreto, cuando las partículas sigan una **dinámica de Hamilton**^{5,6}, la evolución de la función de distribución del sistema viene dada por una **ecuación de Liouville**^{5,9}

$$\frac{DF}{Dt} \equiv \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^N (\mathbf{v}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} F + \mathbf{a}_i \cdot \nabla_{\mathbf{v}_i} F) = 0, \quad \langle 2.2.4 \rangle$$

donde, en el caso más simple, los términos de aceleración para un conjunto

^a En principio se consideran idénticas todas las partículas de una misma especie.

^b Conviene tener presente que un sistema de partículas libres para un mol de sustancia resultaría en un sistema de $3N_A$ ecuaciones de movimiento (con N_A el número de Avogadro).

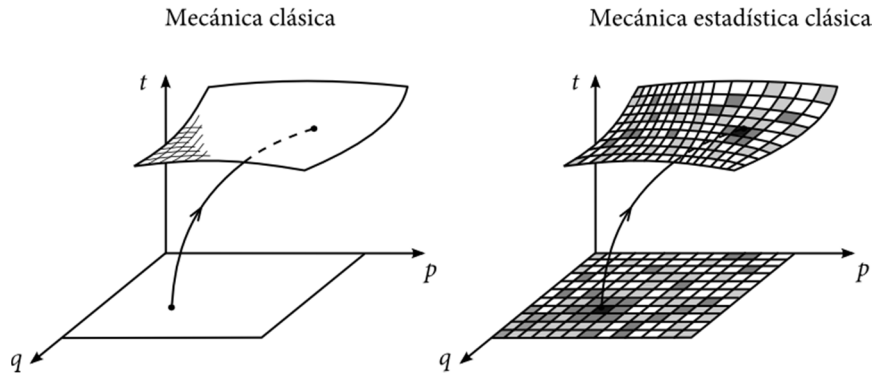


Fig. 2.2-1: Representación esquemática que refleja la diferencia entre la descripción de la mecánica clásica y la mecánica estadística clásica para un sistema de muchas partículas: en la primera (izquierda) la función a toma un valor definido. En cambio, en el segundo caso (derecha), para (\mathbf{r}, t) fijado, a se considera como una función aleatoria.

de partículas cargadas pueden escribirse según la expresión^c:

$$\mathbf{a}_i = \frac{q_i}{m_i} \left[\mathbf{E}^{\text{ext}} - \sum_{(i,j)} \nabla_{\mathbf{r}} \phi_{ij} \right]. \quad \langle 2.2.5 \rangle$$

La primera componente a la derecha de $\langle 2.2.5 \rangle$ refleja la contribución del campo eléctrico externo, mientras que la segunda alude a la interacción interna, donde ϕ_{ij} representa el potencial eléctrico. Así, en la relación $\langle 2.2.5 \rangle$ se asume la **aproximación cuasielectrostática**, donde no se consideran campo magnéticos externos aplicados y se desprecian los inducidos por las corrientes internas asociadas a la descarga, ya que el orden de estas corrientes (en el ámbito de la descarga corona, donde se encuadra este trabajo) varía en el rango de μA a mA .

Desafortunadamente, establecer la relación que vincula F y las variables naturales del problema es una tarea extremadamente compleja, cuando no imposible. No obstante, una descripción del sistema a ese nivel detalle es innecesaria en la gran mayoría de las situaciones prácticas. En tales casos, el interés suele estar dirigido hacia un grupo específico de partículas, por lo que suele prescindirse de toda la información redundante acerca de las restantes partículas integrando sobre las coordenadas y velocidades de estas últimas. Se define así la **función de distribución reducida**, $f^{(s)}$, de acuerdo con la expresión^{d,7}

^c Se utiliza por sencillez un sistema Gaussiano de unidades.

^d Es posible encontrar en la literatura versiones alternativas a la definición de las funciones

$$f^{(s)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{r}_s, \mathbf{v}_s; t) = V^s \int F d\mathbf{r}_{s+1} d\mathbf{v}_{s+1} \dots d\mathbf{r}_N d\mathbf{v}_N. \quad \langle 2.2.6 \rangle$$

Haciendo uso de $\langle 2.2.6 \rangle$, la relación $\langle 2.2.4 \rangle$ conduce a la expresión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(s)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \mathbf{v}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} f^{(s)} + \sum_{i=s+1}^N V^s \int \mathbf{v}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} F dx_{s+1} \dots dx_N \\ + \sum_{i=1}^N V^s \int \mathbf{a}_i \cdot \nabla_{\mathbf{v}_i} F dx_{s+1} \dots dx_N = 0, \end{aligned} \quad \langle 2.2.7 \rangle$$

donde $dx_i = d\mathbf{r}_i d\mathbf{v}_i$. La ecuación $\langle 2.2.7 \rangle$ puede transformarse en una cadena de ecuaciones entrelazadas conocida como la **jerarquía de ecuaciones BBGKI**^{e,10-13}

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(s)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \mathbf{v}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} f^{(s)} + \sum_{i=1}^s \langle \mathbf{a}_i \rangle \cdot \nabla_{\mathbf{v}_i} f^{(s)} \\ - \sum_{i=1}^s \frac{N-s}{V} \frac{q_i}{m_i} \int \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{i,s+1} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_i} f^{(s+1)} d\mathbf{r}_{s+1} d\mathbf{v}_{s+1} = 0, \end{aligned} \quad \langle 2.2.8 \rangle$$

donde

$$\langle \mathbf{a}_i \rangle = \frac{q_i}{m_i} \left[\mathbf{E}^{\text{ext}} - \sum_{\substack{j=1 \\ (i \neq j)}}^s \nabla_{\mathbf{r}_i} \phi_{ij} \right]. \quad \langle 2.2.9 \rangle$$

El conjunto no cerrado de ecuaciones $\langle 2.2.8 \rangle$ contiene toda la información estadística del sistema. Sin embargo, en la práctica, y en particular en la teoría cinética y teoría del transporte, la mayor parte de esta información es irrelevante. El carácter no cerrado de las ecuaciones $\langle 2.2.8 \rangle$ muestra la dificultad esencial de la física estadística: para determinar $f^{(2)}$ se requiere conocer $f^{(3)}$, y así sucesivamente. Por tanto, una solución exacta del problema requeriría la solución de las N (prácticamente infinitas) ecuaciones acopladas para las correspondientes funciones de distribución reducidas.

Existe una extensa bibliografía^{14,8,15,f} donde se exponen y se discuten en detalle las distintas aproximaciones que se consideran en el marco de la física

de distribución en términos de la condición de normalización. En este trabajo se adopta el criterio indicado en la referencia donde se normaliza al volumen.

^e Yvon, Bogolyubov, Born y Green, y Kirkwood obtuvieron el sistema de ecuaciones $\langle 2.2.8 \rangle$ de manera independiente, de ahí el acrónimo con el que se conocen estas ecuaciones en la literatura.

^f Se citan aquí solo algunas de las fuentes clásicas.

estadística así como la justificación de las mismas. No obstante, para los propósitos de este trabajo asumiremos la versión más simple de éstas, conocida como *la aproximación de acoplamiento débil*.

2.3 La aproximación de acoplamiento débil

Cualquier alternativa para resolver el sistema de ecuaciones (2.2.8) requiere de alguna aproximación que permita truncar las ecuaciones a partir de un cierto orden en adelante. Por construcción, la integración de la última ecuación de (2.2.8) sería la manera natural de abordar el problema, ya que contiene toda la información del sistema y nos permitiría prescindir de las restantes $N - 1$ ecuaciones. Sin embargo, como ya se ha comentado, la imposibilidad práctica e innecesaria de este nivel de detalle sugiere alguna alternativa físicamente razonable. Una posibilidad en límite opuesto sería describir el sistema a partir de $f^{(1)}$, un ejemplo de ello es la BE. Para ello es necesario encontrar alguna relación funcional entre $f^{(s)}$ y $f^{(s+1)}$ que permita truncar el conjunto de ecuaciones.

En el contexto de los *gases diluidos* o *enrarecidos* el predominio de las colisiones binarias hace posible reducir el sistema (2.2.8) a los dos primeros órdenes. Como veremos esta simplificación puede aplicarse en el ámbito de los gases débilmente ionizados. En lo que respecta a la relación entre $f^{(2)}$ y $f^{(1)}$, la hipótesis de caos molecular implícita en la BE permite reducir la función de correlación por pareja al producto de las funciones de distribución de sendas partículas. Bajo estas dos consideraciones, el problema de un sistema de muchas partículas descrito por (2.2.8) se reduce al primer orden en una jerarquía BBGKI.

La aproximación de acoplamiento débil se dirige, precisamente, a esta última consideración. Para ello asume que la correlación entre partículas se limita a una región del espacio extremadamente pequeña en comparación con las dimensiones y/o escalas espaciales características del problema. En este sentido, se entiende que la correlación se debilita con la distancia (*principio de debilitamiento de las correlaciones*) de tal modo que a una distancia arbitraria (en la escala del problema) la interacción entre partículas es despreciable.

Por tanto, para consolidar la aproximación de acoplamiento débil en el contexto de las descargas es necesario:

1. Predominio de **colisiones binarias**.
2. La posibilidad de reducir la función de distribución por pareja ($f^{(2)}$) a partir del producto de sendas funciones de distribución de una sola partícula (esto es, $f^{(1)}(1)f^{(1)}(2)$, donde los índices 1 y 2 aluden a las

correspondientes etiquetas de las partículas). Esta condición conecta con una de las hipótesis esenciales para la BE (**hipótesis de caos molecular**).

Colisiones entre partículas en las descargas

Como se ha comentado previamente el predominio de las colisiones binarias permite reducir el sistema de ecuaciones (2.2.8) (jerarquía BBGKI) a sus dos primeros órdenes. Para hacer uso de esta simplificación es necesario estudiar el predominio de las colisiones binarias frente a colisiones de tres cuerpos (colisiones múltiples en general), así como frente al efecto acumulativo de múltiples colisiones débiles.

Colisiones binarias vs colisiones de tres cuerpos

Para sistemas de partículas cuya interacción se limita a colisiones de núcleo duro (aquellas que ocurren en una región extremadamente pequeña del espacio, del orden de varios radios atómicos), la condición de **gas diluido** o **enrarecido** implícita en la BE puede extenderse a la mayoría de las situaciones prácticas en descargas eléctricas.

Para ello basta considerar un sencillo cálculo: es conocido de la teoría de colisiones que la frecuencia entre colisiones puede definirse partir del tiempo medio transcurrido para que tenga lugar una colisión, esto es,

$$v_{en} = \tau^{-1} = \left(\frac{\lambda}{v}\right)^{-1} = N \langle \sigma_{en} v \rangle_{\epsilon_e}, \quad \langle 2.3.1 \rangle$$

donde $\lambda = (N\sigma_{en})^{-1}$ representa el **recorrido libre medio** (asociado al tipo de evento en cuestión), N la densidad numérica del medio, σ_{en} la sección eficaz de dispersión electrón-partícula neutra y v la velocidad relativa entre la partícula proyectil (electrón) y el blanco o diana (partícula neutra del medio).

Por otra parte, en el contexto de gases débilmente ionizados (con un grado de ionización $< 10^{-6}$), en caso de tener lugar un evento de tres cuerpos bajo interacción de núcleo duro, éste puede describirse como sigue:

$$v_{enn} = v_{en} \left(\frac{N^{-1/3}}{\lambda}\right) = N^{2/3} \sigma_{en} v_{en}. \quad \langle 2.3.2 \rangle$$

Es decir, como la probabilidad de que tras una colisión binaria la partícula proyectil se encuentre con otra partícula del medio antes de que tenga lugar otro proceso de colisión binaria.

Por tanto,

$$\frac{\nu_{enn}}{\nu_{en}} = N^{2/3} \sigma_{en} \xrightarrow{p=50 \text{ Torr}} \sim 10^{-4}. \quad \langle 2.3.3 \rangle$$

Así, el orden de magnitud dado en $\langle 2.3.3 \rangle$ manifiesta el predominio de las colisiones binarias (bajo interacción de núcleo duro), y con ello la validez de la condición de gas diluido implícita en la BE.

Colisiones binarias vs efecto acumulativo de colisiones débiles

Acabamos de ver como en el contexto de los gases débilmente ionizados las colisiones binarias predominan sobre las colisiones múltiples. La otra cuestión a examinar es el efecto acumulativo de múltiples colisiones débiles debido a un potencial de interacción de largo alcance como el potencial de Coulomb.

En efecto, una característica clave en la BE es el hecho de interpretar las colisiones de forma localizada. Sin embargo, cuando existen fuerzas de largo alcance como la de Coulomb, éstas no tienen por qué ser las dominantes. En este sentido, el problema clásico de dispersión de Rutherford⁵ suele dividirse en dos regiones (véase Fig. 2.3-1): una zona de dispersión de ángulo “grande”, $\chi \gtrsim \pi/2$; y otra zona asociada a una interacción más débil y con desviaciones menores, $\chi \ll \pi/2$. En el primer caso, se trata de una colisión binaria y representa el escenario natural de la BE. El segundo caso tiene la peculiaridad de que el efecto acumulativo de una secuencia de múltiples colisiones *débiles*, puede producir un resultado similar al que tiene lugar bajo una deflexión de

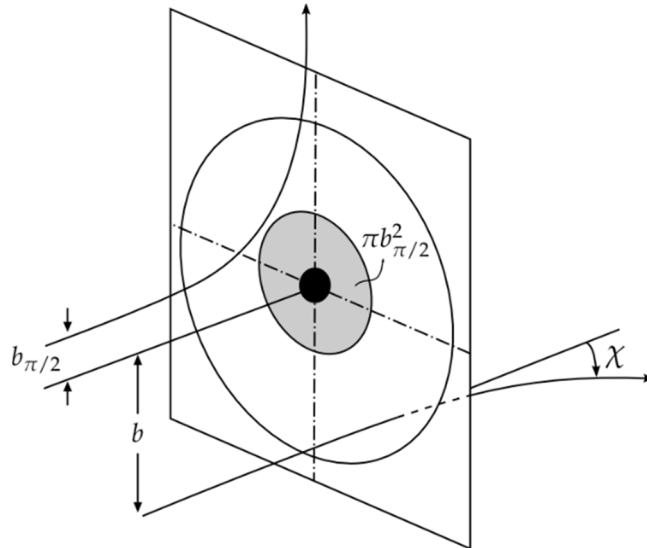


Fig. 2.3-1: Representación esquemática de la sección eficaz de dispersión. La región sombreada muestra la zona donde la interacción es más intensa, produciendo desviaciones comprendidas entre $\pi/2$ y π .

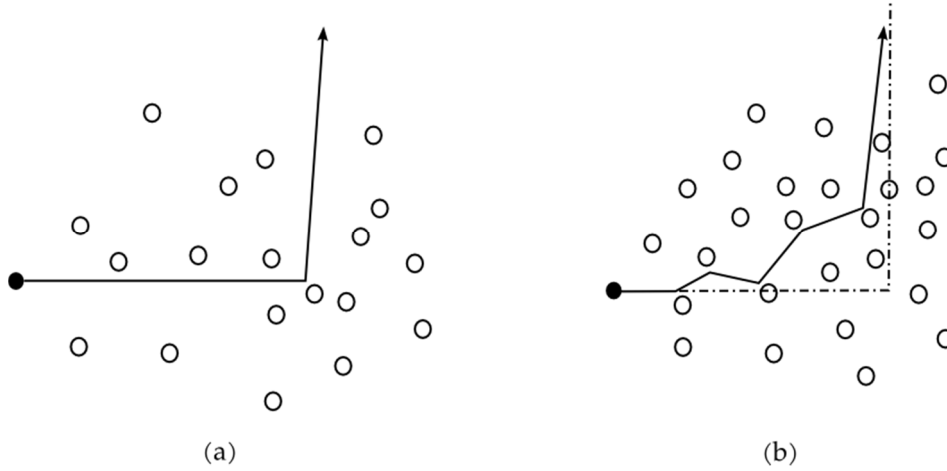


Fig. 2.3-2: Representación de la equivalencia entre una colisión binaria, (a), y el efecto acumulativo de una secuencia de múltiples colisiones de menor intensidad, (b).

ángulo grande. En el caso de las descargas, y general en plasmas, el ámbito de la ecuación de Boltzmann queda delimitado por las condiciones bajo las cuales las colisiones binarias dominan sobre el efecto acumulativo de una secuencia de colisiones *débiles* (véase Fig. 2.3-2). De hecho, este límite suele utilizarse para distinguir los gases débilmente ionizados de los plasmas.

De acuerdo con el problema clásico de dispersión de una partícula bajo un potencial Coulombiano

$$\tan\left(\frac{\chi}{2}\right) = \frac{q_T q_P}{4\pi\epsilon_0 b m_R v^2}, \quad (2.3.4)$$

donde q_T, q_P representan las cargas testigo y proyectil respectivamente, b el parámetro de impacto, m_R la masa reducida del sistema testigo-proyectil, χ el ángulo dispersado y v la velocidad relativa. Por tanto, a partir de (2.3.4) puede deducirse $b_{\pi/2}$, esto es,

$$\chi = \frac{\pi}{2} \rightarrow b_{\pi/2} = \frac{q_T q_P}{4\pi\epsilon_0 m_R v^2} \rightarrow \sigma_{\pi/2} = \pi b_{\pi/2}^2. \quad (2.3.5)$$

La equivalencia de una colisión binaria con el efecto acumulado de una secuencia de colisiones “débiles” (Fig. 2.3-2) puede establecerse a partir del valor cuadrático medio del ángulo dispersado^g

$$1 \text{ rad} \approx \langle \chi^2 \rangle = \Gamma \tau \int_{b_{\pi/2}}^{\lambda_D} 2\pi b db [\chi(b)]^2, \quad (2.3.6)$$

^g Se utiliza que el número de partículas dispersadas un ángulo comprendido entre χ y $\chi + d\chi$ durante un intervalo de tiempo τ , viene dado por la relación $\tau 2\pi \Gamma b db$.

donde $\Gamma = n_p v$, representa el flujo de partículas incidentes. De acuerdo con la relación

$$\sigma^* \Gamma = \nu_{col} = \tau^{-1},$$

se obtiene^h

$$\sigma^* = 8 \ln \left(\frac{\lambda_D}{b_{\pi/2}} \right) \sigma_{\pi/2}. \quad \langle 2.3.7 \rangle$$

Para estimar el impacto de las colisiones débiles en el contexto de las descargas, basta considerar los órdenes de magnitud típicos de las magnitudes relevantes: $E \sim 10^6$ V/m, $v_e \sim 10^6$ m/s, $q \sim 10^{-19}$ C, $m_R \sim m_e \sim 10^{-30}$ kg y $4\pi\epsilon_0 \sim 10^{-10}$ C²/(Nm²). Resulta, entonces,

$$\ln \left(\frac{\lambda_D}{b_{\pi/2}} \right) \approx 10. \quad \langle 2.3.8 \rangle$$

Esto significa que $\sigma^* \sim 10^2 \sigma_{\pi/2}$. No obstante, bajo la condición de gas débilmente ionizado ($n_n \gg n_e \sim n_i$), la frecuencia de colisiones entre electrones y partículas neutras del gas seguirá siendo dominante sobre las frecuencias electrón-electrón o electrón-ion

$$\nu_{en} = n_n \langle v\sigma \rangle_v \gg \nu_{ee} = n_e \langle v\sigma^* \rangle_v. \quad \langle 2.3.9 \rangle$$

En la parte izquierda de $\langle 2.3.9 \rangle$ se utiliza la densidad de partículas neutras como partículas diana o *test*, mientras que en la parte derecha se utiliza la densidad de electrones u otra especie cargada. Esto es así, ya que el primer caso está referido a una interacción fuerte entre las partículas (electrón/neutra), que tiene lugar en una región del espacio extremadamente pequeña, cuando el electrón percibe la repulsión Coulombiana de los orbitales electrónicos. Por el contrario, la parte derecha de $\langle 2.3.9 \rangle$ está asociada a una interacción débil debida al potencial de interacción entre partículas cargadas (int. Coulomb). Es por esto, que para este último caso se toma como campo de partículas diana las especies cargadas.

Factorización de $f_{\alpha\beta}^{(2)}$

Para analizar la posibilidad de reducir la función de distribución por pareja ($f_{\alpha\beta}^{(2)}$) a partir del producto de las funciones de una sola partícula conviene

^h Se hace uso de la condición de ángulo de pequeño, simplificando $\langle 2.3.4 \rangle$ a partir de la condición

$$\tan(\chi/2) \sim \chi/2 \quad (\text{para } \chi \ll 1).$$

definir ésta a partir de un desarrollo por grupos de Mayer^{16,i},

$$f_{\alpha\beta}(1,2) = f_{\alpha}(1)f_{\beta}(2)[1 + P_{\alpha\beta}(1,2)] = f_{\alpha}(1)f_{\beta}(2) + g_{\alpha\beta}(1,2), \quad \langle 2.3.10 \rangle$$

donde $P_{\alpha\beta}(1,2)$ representa la **función de correlación por pareja**. Se deduce entonces que la aproximación de acoplamiento débil requiere la condición

$$P_{\alpha\beta}(1,2) \approx 0 \quad \forall |\mathbf{r}_{12}| > r_c, \quad \langle 2.3.11 \rangle$$

donde $|\mathbf{r}_{12}|$ representa distancia relativa entre las partículas y r_c el **radio de correlación** entre éstas. A continuación se examinan dos casos extremos con los que pueden delimitarse la validez de la aproximación $\langle 2.3.11 \rangle$ en el contexto de las descargas. Esto supone acotar la **hipótesis de caos molecular** implícita en la BE.

Validez en el contexto del equilibrio termodinámico

En el **equilibrio termodinámico**, donde la función de distribución para una sola partícula sigue una distribución de Maxwell¹⁷,

$$f_{\alpha}(\mathbf{v}) = \left(\frac{m_{\alpha}}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-m_{\alpha} \mathbf{v}^2 / 2k_B T}, \quad \langle 2.3.12 \rangle$$

se encuentra que⁷

$$P_{\alpha\beta}(1,2) = -\frac{q_{\alpha}q_{\beta}}{k_B T} \frac{1}{|\mathbf{r}_{12}|} e^{-|\mathbf{r}_{12}|/\lambda_D}, \quad \langle 2.3.13 \rangle$$

donde el factor,

$$\frac{1}{r_{12}} e^{-r_{12}/\lambda_D} \quad (r_{12} \equiv |\mathbf{r}_{12}|), \quad \langle 2.3.14 \rangle$$

representa el potencial de *Yukawa* y λ_D la **longitud de Debye**

$$\lambda_D = \left[\sum_{\alpha=1}^{\nu} \left(\frac{4\pi \bar{n}_{\alpha} q_{\alpha}^2}{k_B T} \right) \right]^{-1/2}. \quad \langle 2.3.15 \rangle$$

De acuerdo con $\langle 2.3.13 \rangle$, cuando $r_{12} \gg \lambda_D$ la interacción cae rápidamente, mientras que en el caso opuesto, $r_{12} \ll \lambda_D$, se obtiene prácticamente el potencial de la partícula en el vacío. Por tanto, la longitud de Debye expresa

ⁱ Por sencillez, se utiliza la notación compacta:

$$f_{\alpha}(1) \equiv f_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{r}_{\alpha}, \mathbf{v}_{\alpha}; t),$$

$$f_{\alpha\beta}^{(2)}(1,2) \equiv f_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{r}_{\alpha}, \mathbf{v}_{\alpha}, \mathbf{r}_{\beta}, \mathbf{v}_{\beta}; t),$$

donde $f_{\alpha}^{(1)}$ representa la función de distribución reducida para una partícula de la especie α ; y $f_{\alpha\beta}^{(2)}$ la función de distribución reducida para dos partículas, una de la especie α y otra de la especie β .

la distancia a partir de la cual una partícula deja de percibir la interacción individual (partícula-partícula), para interactuar vía campo medio creado por todas las restantes partículas. Es por esto, que desempeña un papel esencial a hora de contemplar interacciones débiles y, con ello, el rango de validez de la BE.

Para realizar una estimación representativa de este parámetro es posible considerar aquellas regiones dominadas por la ionización, donde las especies predominantes serán los electrones e iones positivos producidos vía ionización directa. En tal caso, en el intervalo en el que las densidades locales sean aproximadamente iguales, $\bar{n}_e \approx \bar{n}_i$, la longitud de Debye resulta

$$\lambda_D = \left[\frac{8\pi\bar{n}_e e^2}{k_B T} \right]^{-1/2} \approx 4,88 \left(\frac{T[\text{K}]}{\bar{n}_e[\text{cm}^{-3}]} \right)^{1/2}. \quad \langle 2.3.16 \rangle$$

Típicamente en descargas eléctricas, $T_e \sim 10^4 \text{ K}$ y $\bar{n}_e \sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, por lo que $\lambda_D \sim 1 \mu\text{m}$. De acuerdo con $\langle 2.3.13 \rangle$

$$\frac{|g_{\alpha\beta}(1,2)|}{f_\alpha(1)f_\beta(2)} = |P_{\alpha\beta}(1,2)| = \frac{q_\alpha q_\beta}{k_B T} \frac{1}{r_{12}} e^{-r_{12}/\lambda_D} = \frac{g}{8\pi} \frac{e^{-r_{12}/\lambda_D}}{r_{12}/\lambda_D}, \quad \langle 2.3.17 \rangle$$

donde

$$g = \frac{1}{\bar{n}_e \lambda_D^3}. \quad \langle 2.3.18 \rangle$$

La magnitud g se conoce como **parámetro del plasma** (adimensional), y expresa la inversa del número de partículas (electrones) contenidos en una celda cúbica de lado igual λ_D .

Atendiendo al significado físico de λ_D , cuando $r_{12} = \lambda_D$, de $\langle 2.3.17 \rangle$ resulta

$$|P_{\alpha\beta}(1,2)| \approx 0.15g. \quad \langle 2.3.19 \rangle$$

Este hecho manifiesta que en el caso $g \ll 1$, cualquiera que sea el valor de r_{12} , la función de distribución por pareja podrá factorizarse por medio de las correspondientes funciones de una sola partícula.

Típicamente en descargas eléctricas, el valor g suele estar comprendido en el rango $(10^{-5}, 10^{-3})$. Este hecho constata la validez de esta aproximación en condiciones de **equilibrio termodinámico local (LTE)**, esto es,

$$f_{\alpha\beta}(1,2) \approx f_\alpha(1)f_\beta(2). \quad \langle 2.3.20 \rangle$$

Validez fuera del equilibrio termodinámico. Método de Dupree¹⁸

Si bien el resultado $\langle 2.3.19 \rangle$ pone de manifiesto la bondad de la aproximación

de acoplamiento débil en el equilibrio termodinámico, solo podemos esperar que esta simplificación siga siendo válida en situaciones de fuera del equilibrio. No obstante, tanto para sistemas que interaccionan débilmente como para sistemas con una interacción arbitraria pero con baja densidad, puede establecerse que una aproximación del tipo <2.3.20> es válida (véase Ajiezer¹⁹ para una discusión detallada). En esencia, esta aproximación puede interpretarse en términos de las diferentes escalas de tiempo que siguen las funciones de distribución de una y muchas partículas. Este es el argumento que sigue Bogolyubov¹¹ (conjetura de Bogolyubov) para explicar la evolución en el tiempo que sigue el sistema cuando parte de una situación fuera del equilibrio. Para ello define esta evolución de acuerdo con tres escalas características de tiempo^{8,14}:

Fase 1: Inicial. Relacionada con el periodo de tiempo, $\tau_c \sim r_c / \bar{v}$, siendo r_c el radio de correlación y \bar{v} la velocidad media de las partículas. Es claro que esta fase refleja el efecto de las correlaciones entre las partículas. Estas funciones sólo son significativas en cierta región del espacio, y con ello durante un intervalo de tiempo limitado. Por tanto, puede entenderse esta fase como una versión extendida del concepto de **colisión** dado en la teoría cinética de gases.

Fase 2: Cinética. Asociada al tiempo medio entre colisiones, $\tau_{mfp} \sim \lambda_{mfp} / \bar{v}$, donde λ_{mfp} representa la distancia media entre colisiones sucesivas y \bar{v} la velocidad media de las partículas.

Fase 3: Hidrodinámica. Comprende la escala de tiempo de la relajación macroscópica. La longitud característica de esta escala, ℓ_H , mide la razón de la variación espacial de $f^{(1)}$ en sistemas no homogéneos. A menudo suele estar relacionada con el gradiente local de alguna de las magnitudes macroscópicas tales como densidad, temperatura, etc,

$$\ell_H^{-1} \sim \max \left(\frac{|\nabla f|}{f} \right) \Rightarrow \tau_H \sim \frac{\ell_H}{\bar{v}}, \quad \langle 2.3.21 \rangle$$

donde \bar{v} representa la velocidad media de las partículas. Este período se caracteriza por el hecho de que después de algunas colisiones, el sistema alcanza un *equilibrio local*. A partir de estos estados de cuasiequilibrio, el sistema puede describirse por medio de la función de distribución de una partícula, e incluso haciendo uso de los primeros momentos.

La conjetura de Bogolyubov (o **régimen hidrodinámico**, como se conoce en un contexto más amplio que el de la teoría cinética de gases) responde a la intuición física por la que se entiende que en el proceso de relajación, las fases anteriormente citadas preservan dicho orden con un carácter perfectamente

segregado, es decir,

$$\tau_c \ll \tau_{mfp} \ll \tau_H, \quad \langle 2.3.22 \rangle$$

o bien, que,

$$\lambda_D = r_c \ll \ell_{mfp} \ll \ell_H. \quad \langle 2.3.23 \rangle$$

La dinámica secuencial a la que responde la intuición de Bogolyubov permite interpretar una evolución segregada de las funciones de distribución

$$f_\alpha \rightarrow f_{\alpha\beta} \rightarrow f_{\alpha\beta\gamma} \rightarrow \dots$$

En estas condiciones tiene sentido una aproximación de primer orden (en el contexto de la aprox. de acoplamiento débil) para el problema de las colisiones binarias, donde

$$f_{\alpha\beta}(1,2) \approx f_\alpha(1)f_\beta(2).$$

Antes de aclarar la relación entre estas escalas de tiempo y las funciones de distribución conviene tener presente las limitaciones asociadas a este orden de escalas (ec. $\langle 2.3.22 \rangle$ y/o $\langle 2.3.23 \rangle$). Particularmente en el caso de las descargas en gases pueden darse situaciones donde el régimen hidrodinámico no se satisface, tales como los frentes de choques que pueden desarrollarse en la evolución de la descarga donde el gradiente de densidad o de alguna otra variable macroscópica tiene lugar en una región del espacio extremadamente pequeña (como ejemplo de este tipo de situaciones puede verse §3.6 y/o §4.5).

Salvando este tipo de situaciones, la relación entre las escalas de tiempo definidas por Bogolyubov y las funciones de distribución puede interpretarse de acuerdo con el hecho de que en la práctica todas las ecuaciones cinéticas surgen de algún desarrollo perturbativo. En este sentido la aproximación de acoplamiento débil sugiere como estado de referencia aquél en el que todas las interacciones quedan “apagadas”. Es decir, se asume que el potencial de interacción entre las partículas es despreciable a cualquier distancia. En estas circunstancias, de acuerdo con la interpretación del parámetro del plasma (ec. $\langle 2.3.18 \rangle$), se tiene

$$\phi_{ij}(r) \equiv g\varphi_{ij}(r), \quad |\phi(r)| = O(g). \quad \langle 2.3.24 \rangle$$

A partir de $\langle 2.3.24 \rangle$, se define un **sistema débilmente acoplado** en las siguientes condiciones

$$g \ll 1, \quad \left| \frac{\varphi(r)}{\varphi(r_0)} \right| = O(1) \quad \forall r, \quad \langle 2.3.25 \rangle$$

donde r_0 representa una distancia finita arbitraria.

Así, al imponer la condición $\langle 2.3.25 \rangle$ sobre los dos primeros órdenes de

la BBGKI (ec. <2.2.8>) se obtiene una evolución segregada para las funciones de distribución, tal y como prescribe el régimen hidrodinámico. En efecto, tomando los dos primeros órdenes de <2.2.8>, para f_α se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} f_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \mathbf{E}^{\text{ext}} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_\alpha} f_\alpha \\ - \sum_{\beta=1}^{\nu} \bar{n}_\beta \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \int \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} \phi_{\alpha\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_\alpha} f_{\alpha\beta} d\mathbf{r}_\beta d\mathbf{v}_\beta = 0, \end{aligned} \quad \langle 2.3.26 \rangle$$

donde se ha utilizado que $N_\beta \gg 1$ y $\bar{n}_\beta = N_\beta/V$. Y, para el caso de $f_{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\alpha\beta}}{\partial t} + \mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} f_{\alpha\beta} + \mathbf{v}_\beta \cdot \nabla_{\mathbf{r}_\beta} f_{\alpha\beta} \\ + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} [\mathbf{E}^{\text{ext}} - \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} \phi_{\alpha\beta}] \cdot \nabla_{\mathbf{v}_\alpha} f_{\alpha\beta} \\ + \frac{q_\beta}{m_\beta} [\mathbf{E}^{\text{ext}} - \nabla_{\mathbf{r}_\beta} \phi_{\beta\alpha}] \cdot \nabla_{\mathbf{v}_\beta} f_{\alpha\beta} \\ - \sum_{\beta=1}^{\nu} \bar{n}_\beta \frac{q_\alpha}{m_\alpha} \int \nabla_{\mathbf{r}_\alpha} \phi_{\alpha\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_\alpha} f_{\alpha\beta\gamma} d\mathbf{r}_\beta d\mathbf{v}_\beta \\ - \sum_{\alpha=1}^{\nu} \bar{n}_\alpha \frac{q_\beta}{m_\beta} \int \nabla_{\mathbf{r}_\beta} \phi_{\beta\alpha} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_\beta} f_{\alpha\beta\gamma} d\mathbf{r}_\alpha d\mathbf{v}_\alpha = 0, \end{aligned} \quad \langle 2.3.27 \rangle$$

que, nuevamente, hace uso de la condición $N_\alpha \gg 1$ y $N_\beta \gg 1$. Luego, la aproximación de acoplamiento débil (ec. <2.3.25>) sobre <2.3.26> y <2.3.27>, supone que el potencial de interacción entre partículas aparece como una corrección de primer orden. Esto significa que en una aproximación de orden cero, respecto del parámetro g , no se considera el efecto de interacción entre partículas,

$$\begin{aligned} f_\alpha(1) &= O(1), \\ f_{\alpha\beta}(1,2) &= O(g). \end{aligned} \quad \langle 2.3.28 \rangle$$

Como resultado de ello puede despreciarse el término integral en <2.3.26>, resultando una derivada material de f_α igualada a cero, es decir, f_α permanece constante. Por tanto, durante la fase inicial, τ_c , f_α no varía.

La siguiente fase contenida en el régimen hidrodinámico (escala cinética) contempla la variación de f_α debido al efecto de la interacción entre partículas. De modo que en una corrección de primer orden sobre la fase previa se desprecian los dos últimos términos en <2.3.27>, ya que

$$P_{\alpha\beta\gamma}(1,2,3) = O(g^2). \quad \langle 2.3.29 \rangle$$

Esto es así, dado que las correlaciones de tres cuerpos requieren de, al menos,

dos procesos de interacción (sea por ejemplo: $1 - 2$ y $1 - 3$, donde los índices se refieren a las etiquetas de las partículas implicadas, α , β y γ , respectivamente). Lo que significa que $f_{\alpha\beta}$ permanece constante durante esta fase. Por el contrario, la presencia de $f_{\alpha\beta}$ en (2.3.26) hace que en esta escala de tiempo, f_α varíe. De este modo, en la escala cinética y en condiciones de régimen hidrodinámico, $f_{\alpha\beta}$ (y en general los órdenes superiores) sufre un borrado de memoria, ya que su dependencia en el tiempo se refleja exclusivamente a partir de la variación de f_α ,

$$f^{(s)}(x_1, \dots, x_s; t) \xrightarrow{t \gg \tau_c} f^{(s)}(x_1, \dots, x_s; f^{(1)}(x', t)), \quad (2.3.30)$$

donde $x_i = (\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$.

Por tanto, fuera del equilibrio, la aproximación de acoplamiento débil induce la secuencia de escalas prescritas por el régimen hidrodinámico. En estas condiciones, las funciones de distribución admiten un desarrollo perturbativo basado en un desarrollo en potencias de g

$$\begin{aligned} f_\alpha &= f_{\alpha,0}, \\ f_{\alpha\beta} &= f_\alpha f_\beta + g g_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta,0} + g f_{\alpha\beta,1}, \\ f_{\alpha\beta\gamma} &= f_{\alpha\beta\gamma,0} + g f_{\alpha\beta\gamma,1} + g^2 f_{\alpha\beta\gamma,2}, \text{ etc.} \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

De este modo, en una aproximación de primer orden para el problema de las colisiones binarias, el sistema (2.2.8) puede reducirse a su primer orden, ya que de acuerdo con (2.3.31)

$$f_{\alpha\beta}(1,2) \approx f_\alpha(1)f_\beta(2).$$

Finalmente, tanto en el contexto de LTE como en el de régimen hidrodinámico con predominio de colisiones binarias es posible describir un sistema de muchas partículas (ec. (2.2.8)) a partir de la función de distribución de una sola partícula, f_α . Condiciones éstas que delimitan la ámbito de la BE, ya que constituyen las bases de esta afamada ecuación.

Limitaciones de una descripción asintótica

El carácter lineal de la ecuación de Liouville (2.2.4) facilita el uso de desarrollos perturbativos para resolver el sistema de ecuaciones (2.2.8). Sin embargo, en el estudio de las descargas eléctricas y, en general, de los plasmas, la evolución *secular*^j de la soluciones puede conducir a que la representación dada por un desarrollo perturbativo sea incorrecta. Un ejemplo sencillo pueden ser aquellas propiedades macroscópicas que relajan con el tiempo de acuerdo con la expresión

^j Funciones que crecen sistemáticamente en el tiempo, tales como potencias del tiempo, t .

$$e^{-\epsilon t} = 1 - \epsilon t + \frac{\epsilon^2 t^2}{2} - \frac{\epsilon^3 t^3}{6} + \dots$$

donde ϵ representa el parámetro de orden del desarrollo. En este caso, aun cuando ϵ tome valores pequeños que justifiquen un desarrollo limitado a los primeros órdenes, la descripción asintótica para tiempos suficientemente largos dejará de ser válida. Este hecho pone de manifiesto la importancia práctica que supone fijar ciertos límites a una descripción basada en este tipo de desarrollos, donde se trunca la descripción del sistema a unos pocos términos. En esencia, esta característica muestra la incapacidad de un desarrollo en pocos términos para describir la relajación a tiempos largos de un sistema macroscópico.

2.4 La ecuación de Boltzmann

Como hemos visto la aproximación de acoplamiento débil contiene dos de las hipótesis cruciales en la BE: la **condición de gas diluido**, que se traduce en el predominio de las colisiones binarias; y la **hipótesis de caos molecular** que permite reducir el problema de colisiones binarias en la BBGKI al primer orden de ésta jerarquía de ecuaciones, factorizando la función de distribución por pareja, esto es,

$$f_{\alpha\beta}(1,2) \approx f_{\alpha}(1)f_{\beta}(2).$$

En estas condiciones, la expresión <2.3.26> puede reescribirse en la forma:

$$\frac{Df_{\alpha}}{Dt} + \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{E}^{(\text{tot})} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_{\alpha}} f_{\alpha} = \left. \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \right|_c \quad \langle 2.4.1 \rangle$$

donde se han utilizado las relaciones,

$$\left. \begin{aligned} \frac{D}{Dt} &= \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_{\alpha} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_{\alpha}}, \\ \mathbf{E}^{(\text{tot})} &= \mathbf{E}^{(\text{ext})} + \langle \mathbf{E} \rangle, \\ \langle \mathbf{E} \rangle &= - \sum_{\beta=1}^{\nu} \bar{n}_{\beta} \int \nabla_{\mathbf{r}_{\alpha}} \left(\frac{q_{\beta}}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|} \right) f_{\beta} d\mathbf{r}_{\beta} d\mathbf{v}_{\beta}, \\ \left. \frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \right|_c &= \sum_{\beta=1}^{\nu} \bar{n}_{\beta} \int [\mathbf{a}_{\alpha\beta}^{(\text{int})} - \langle \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{(\text{int})} \rangle] \cdot \nabla_{\mathbf{v}_{\alpha}} [f_{\alpha} f_{\beta}] d\mathbf{r}_{\beta} d\mathbf{v}_{\beta}. \end{aligned} \right\} \quad \langle 2.4.2 \rangle$$

siendo $\langle \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{(\text{int})} \rangle$ la componente de la aceleración debida a la interacción entre partículas vía campo medio; el factor $[\mathbf{a}_{\alpha\beta}^{(\text{int})} - \langle \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{(\text{int})} \rangle]$ en el término de colisión, la aceleración debida a la interacción partícula-partícula; y $\langle \mathbf{E} \rangle$ el **campo medio** generado por todas las partículas. Este tipo de campos también

se conocen como **campos autoconcordantes o autoconsistentes**^k. Además, estos campos internos satisfacen las ecuaciones de Maxwell (**aprox. cuasielectrostática**, véase §2.2)

$$\left. \begin{aligned} \nabla \cdot \langle \mathbf{E} \rangle &= \sum_{\beta=1}^{\nu} \bar{n}_{\beta} q_{\beta} \int f_{\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} = 4\pi Q(\mathbf{r}, t), \\ \nabla \times \langle \mathbf{E} \rangle &= 0. \end{aligned} \right\} \quad \langle 2.4.3 \rangle$$

Por tanto la versión $\langle 2.4.1 \rangle$ para el primer orden de la BBGKI distingue dos tipos de términos de colisión (en primer orden de aproximación): por un lado un término de colisión asociado a la interacción vía campo medio y, por otra parte, un término de colisión relacionado con la interacción partícula-partícula (colisión de *núcleo duro*, de acuerdo los resultados mostrados en §2.3). De manera que este último responde al prototipo de término de colisión de la BE.

En la práctica, la escala temporal observable de la descarga cumple que $\Delta t \gg \tau_c$, y con ello el término de **colisión** $\partial f_{\alpha} / \partial t|_c$ en $\langle 2.4.1 \rangle$ puede transformarse, finalmente, en un término de colisión de tipo Boltzmann, esto es,

$$\left. \frac{\partial \bar{f}_{\alpha}}{\partial t} \right|_c = \int d\mathbf{v}_{\alpha\beta} \int d\Omega \mathbf{v}_{\alpha\beta} \sigma(v_{\alpha\beta}) [\bar{f}'_{\alpha} \bar{f}'_{\beta} - \bar{f}_{\alpha} \bar{f}_{\beta}], \quad \langle 2.4.4 \rangle$$

donde los superíndices “'” aluden a las funciones de distribución después de la colisión, mientras que las funciones \bar{f}_{α} y \bar{f}_{β} están referidas a la situación previa a la colisión. La transición desde el término de colisión de $\langle 2.4.2 \rangle$ a $\langle 2.4.4 \rangle$, siguiendo los argumentos de Kirkwood^{13,20}, se deduce mediante un promedio temporal sobre la escala τ_c . Esto significa que $\langle 2.4.1 \rangle$ se promedia en un intervalo de tiempo τ^* , suficientemente largo en comparación con τ_c , pero a su vez suficientemente corto con relación a τ_{mfp} (escala de tiempo para la variación de f_{α})

$$\bar{f}_{\alpha} = \frac{1}{\tau^*} \int_0^{\tau^*} f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t + s) ds. \quad \langle 2.4.5 \rangle$$

Como resultado de ello $\langle 2.4.1 \rangle$ queda como sigue

$$\frac{D\bar{f}_{\alpha}}{Dt} + \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{E}^{tot) \cdot \nabla_{\mathbf{v}_{\alpha}} \bar{f}_{\alpha} = \left. \frac{\partial \bar{f}_{\alpha}}{\partial t} \right|_c, \quad \langle 2.4.6 \rangle$$

donde

^k La notación de *autoconsistente* para este tipo de campos se debe a que sus fuentes dependen de la función de distribución, f_{β} , y ésta a su vez depende del campo a través de la ecuación cinética. Por tanto, ambos deben calcularse simultáneamente de una manera consistente.

$$\left. \frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial t} \right|_c = \sum_{\beta=1}^{\nu} \frac{\bar{n}_\beta}{\tau^*} \int_0^{\tau^*} ds \iint [\mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\text{int)}} - \langle \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\text{int)}} \rangle] \cdot \nabla_{\mathbf{v}_\alpha} [f_\alpha f_\beta] d\mathbf{r}_\beta d\mathbf{v}_\beta. \quad \langle 2.4.7 \rangle$$

La relación $\langle 2.4.7 \rangle$ puede transformarse en un término de colisión del tipo (Kirkwood^{13,20}):

$$\left. \frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial t} \right|_c = \int [\bar{f}'_\alpha \bar{f}'_\beta - \bar{f}_\alpha \bar{f}_\beta] d\mathbf{r} d\mathbf{v}_\beta, \quad \langle 2.4.8 \rangle$$

en las condiciones anteriormente citadas:

1. Dominio de colisiones binarias.
2. Hipótesis de caos molecular: $f_{\alpha\beta}(1,2) \approx f_\alpha(1)f_\beta(2)$.

Finalmente, la forma clásica del término de colisión de Boltzmann (ec. $\langle 2.4.4 \rangle$) puede deducirse al integrar sobre la distancia relativa ($\mathbf{r}_{\alpha\beta} = \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta$) en $\langle 2.4.8 \rangle$, adoptando para ello el sistema en coordenadas cilíndricas (z, b, ϕ). La dirección \hat{z} se toma antiparalela al vector de velocidad relativa, $\mathbf{v}_{\alpha\beta} = \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta$ (véase Fig. 2.4-1).

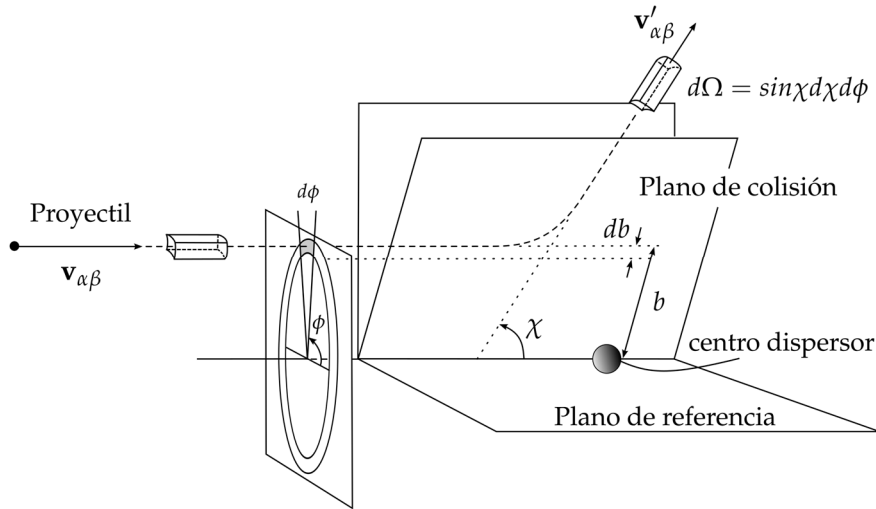


Fig. 2.4-1: Esquema ilustrativo de la geometría de una colisión binaria.

2.5 La aproximación fluida

El modelo macroscópico o aproximación fluida en las descargas está basado en el método de los momentos de Grad²¹. Esta aproximación caracteriza el estado del fluido por medio de 13 magnitudes escalares: **densidad**, $n_\alpha(\mathbf{r}, t)$; **velocidad media**, $\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r}, t)$; **tensor de presión**, \mathbf{P}_α ; y el **vector flujo de calor**, $\mathbf{Q}_\alpha(\mathbf{r}, t)$. La conexión entre el modelo microscópico derivado de la BE y las

magnitudes termodinámicas viene dada por los momentos de la función de distribución. De este modo,

$$n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \int \bar{f}_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad \langle 2.5.1 \rangle$$

define la **densidad** de la especie α como una función que depende solo de la posición para un instante dado, t . Si la integración en $\langle 2.5.1 \rangle$ se realiza sobre la ecuación que gobierna la dinámica de \bar{f}_α (ec. $\langle 2.4.6 \rangle$) en lugar de \bar{f}_α , entonces se obtiene una expresión para la dinámica de la densidad en conexión con la dinámica microscópica, esto es,

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (n_\alpha \mathbf{u}_\alpha) = \sum_\beta C_{\alpha\beta}. \quad \langle 2.5.2 \rangle$$

Esta relación responde al prototipo de **ecuación de continuidad**, donde

$$\mathbf{u}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{\int \mathbf{v} \bar{f}_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}}{\int \bar{f}_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}} = \frac{\int \mathbf{v} \bar{f}_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}}{n_\alpha(\mathbf{r}, t)}, \quad \langle 2.5.3 \rangle$$

representa la **velocidad media** de dicha especie y $C_{\alpha\beta}$ el efecto de creación/destrucción de partículas de la especie α como resultado de la interacción con las restantes especies

$$C_{\alpha\beta} = \int \left[\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial t} \right]_{c-\beta} d\mathbf{v}. \quad \langle 2.5.4 \rangle$$

Para resolver la ecuación de continuidad es necesario conocer la ecuación para la velocidad media. Para ello, se sigue el mismo proceso que para la densidad, en relación ahora con $\langle 2.5.3 \rangle$, de lo que se obtiene la **ecuación de conservación del momento**

$$m_\alpha n_\alpha \frac{D\mathbf{u}_\alpha}{Dt} = n_\alpha q_\alpha \mathbf{E}^{(\text{tot})} - \nabla \cdot \mathbf{P}_\alpha - \mathbf{R}_\alpha, \quad \langle 2.5.5 \rangle$$

donde,

$$\mathbf{P}_\alpha = m_\alpha \int (\mathbf{v} - \mathbf{u}_\alpha) (\mathbf{v} - \mathbf{u}_\alpha) \bar{f}_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \quad \langle 2.5.6 \rangle$$

representa el **tensor de presiones** y \mathbf{R}_α la fricción neta debido al efecto de las colisiones

$$\mathbf{R}_\alpha = m_\alpha \sum_\beta \mathbf{R}_{\alpha\beta} = m_\alpha \sum_\beta \int \mathbf{v} \left[\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial t} \right]_{c-\beta} d\mathbf{v}. \quad \langle 2.5.7 \rangle$$

En particular, cuando la distorsión de la función de distribución respecto de la situación de equilibrio termodinámico es relativamente débil, $\langle 2.4.7 \rangle$

puede reescribirse en términos del operador de colisión de Krook²², esto es,

$$\left[\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial t} \right]_c = -\nu [\bar{f}_\alpha - \bar{f}_{\alpha,0}], \quad \langle 2.5.8 \rangle$$

donde $\bar{f}_{\alpha,0}$ representa la función de distribución en el equilibrio termodinámico. Resulta, entonces,

$$\mathbf{R}_\alpha = \sum_\beta m_\alpha n_\alpha \nu_{\alpha\beta}^* (\mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u}_\beta), \quad \langle 2.5.9 \rangle$$

donde

$$\nu_{\alpha\beta}^* = \frac{m_\beta n_\beta}{\sum_\gamma m_\gamma n_\gamma} \nu_m, \quad \langle 2.5.10 \rangle$$

representa la **frecuencia de colisiones** entre las especies α y β . La relación $\langle 2.5.10 \rangle$ está referida a las colisiones elásticas cuya sección eficaz (ν_m) suele ser dominante en la mayoría de las situaciones prácticas para las descargas. En cualquier caso, la ecuación $\langle 2.5.10 \rangle$ es fácilmente generalizable a cualquier tipo de proceso, tales como la ionización directa, captura electrónica, recombinación, excitación, ionización por pasos, etc. En general, la frecuencia de colisión asociada a un proceso de interacción entre electrones (e) y las moléculas del medio (n) puede expresarse como sigue

$$\nu_{en} = \langle \tau_{en}^{-1} \rangle = n_n \langle \sigma_{en} v_e \rangle_v = \frac{n_n}{n_e} 4\pi \int_0^{+\infty} \bar{f}_e(v) \sigma_{en}(v) v^3 dv, \quad \langle 2.5.11 \rangle$$

donde el factor $\langle \sigma_{en} v_e \rangle_v$ representa la **tasa de reacción**, siendo σ_{en} la sección eficaz de colisión electrón-molécula neutra del gas para el proceso en cuestión.

Nuevamente, para resolver la ecuación del momento $\langle 2.5.5 \rangle$ es necesario conocer la dinámica del tensor de presiones. Para ello se sigue el mismo proceso que el utilizado para la densidad y conservación del momento, de lo que resulta:

$$\frac{3}{2} \frac{D\mathbf{P}_\alpha}{Dt} + \frac{5}{2} \mathbf{P}_\alpha \nabla \cdot \mathbf{u}_\alpha = -\nabla \cdot \mathbf{Q}_\alpha + \mathbf{R}_{\alpha\beta} \cdot \mathbf{u}_\alpha - \left(\frac{\partial \mathbb{W}}{\partial t} \right)_{E,\alpha}, \quad \langle 2.5.12 \rangle$$

donde \mathbf{Q}_α representa el vector **flujo de energía térmica** o **flujo de calor**

$$\mathbf{Q}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} m_\alpha \int (\mathbf{v} - \mathbf{u}_\alpha)^2 (\mathbf{v} - \mathbf{u}_\alpha) \bar{f}_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}. \quad \langle 2.5.13 \rangle$$

Por otra parte, el último término de $\langle 2.5.12 \rangle$ representa el flujo de calor asociado al efecto de las colisiones,

$$\sum_{\beta} \int \frac{m_{\alpha} v^2}{2} \left[\frac{\partial f_{\alpha}}{\partial t} \right]_{c-\beta} \bar{f}_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} = - \left(\frac{\partial \mathbb{W}}{\partial t} \right)_{E, \alpha}. \quad \langle 2.5.14 \rangle$$

A diferencia del sistema de ecuaciones entrelazadas de la BBGKI, la cadena de ecuaciones macroscópicas trabaja en el espacio físico (\mathbf{r}, t) , y puede truncarse haciendo uso de alguna relación fenomenológica. Una amplia gama de procesos que tienen lugar en el desarrollo de las descargas pueden explicarse por medio de las aproximaciones de **plasma frío** y **templado**. En ambos casos se desprecian los flujos de calor, siendo la única diferencia entre éstas aproximaciones el tratamiento del término de presión, despreciable en el primer caso; y considerando solo la componente escalar en el segundo.

En este trabajo se adoptará la aproximación de *plasma templado* para describir la evolución de las descargas,

$$\left. \begin{aligned} \frac{Dn_{\alpha}}{Dt} + n_{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{u}_{\alpha} &= \sum_{\beta} C_{\alpha\beta}, \\ m_{\alpha} n_{\alpha} \frac{D\mathbf{u}_{\alpha}}{Dt} &= n_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{E}^{\text{tot}} - \nabla \cdot \mathbf{P}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\alpha} \\ \frac{N}{2} \frac{D\mathbf{P}_{\alpha}}{Dt} + \frac{N+2}{2} \mathbf{P}_{\alpha} \nabla \cdot \mathbf{u}_{\alpha} &= 0, \end{aligned} \right\} \quad \langle 2.5.15 \rangle$$

donde N representa la dimensión del espacio de velocidades.

2.6 Efectos de superficie

Desde luego el modelado de los efectos de superficie en este trabajo se limita a la versión más simple de éstos. Esta sección repasa algunos de los principales mecanismos clásicos implicados en la emisión secundaria de electrones en la superficie de los electrodos. Precisamente, con la intención de aclarar qué efectos deben modelarse en primer plano y cuáles juegan un papel secundario se adopta una perspectiva cuantitativa, a partir de la cual se deduce que la emisión secundaria por impacto iónico es la principal contribución en la inmensa mayoría de los casos de interés en las descargas. No obstante, merece la pena entender como el rol de la emisión termiónica pasa a un primer plano para el caso de las descargas tipo arco debido al calentamiento del cátodo.

De acuerdo con la física estadística, la distribución de electrones “libres” en un metal viene dada por la conocida función de distribución de Fermi-Dirac:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{(\epsilon - \mu)/k_B T}}, \quad \langle 2.6.1 \rangle$$

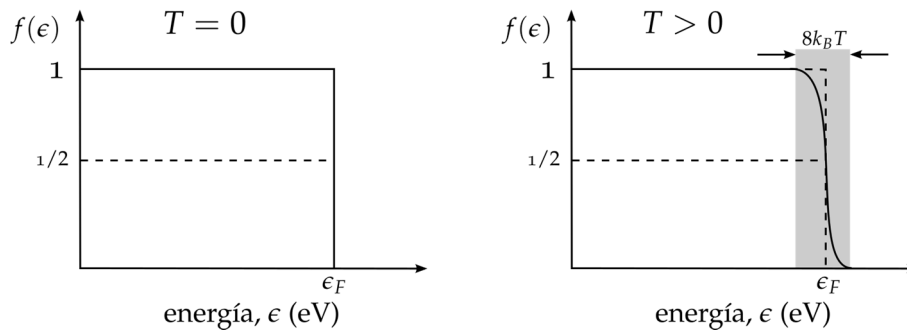


Fig. 2.6-1: Representación esquemática de la función de distribución de Fermi-Dirac.

donde ϵ representa la energía de los electrones, μ el potencial químico del metal y T es la temperatura del metal. La relación (2.6.1) toma valores comprendidos entre 0 y 1, representando la ocupación de los estados de energía ϵ . Como puede verse en la representación de (2.6.1) (Fig. 2.6-1), a $T = 0$ K, el umbral energético por debajo del cual todos los estados están ocupados se conoce como **nivel de Fermi**, ϵ_F . Con el aumento de la temperatura una pequeña proporción de los electrones cercanos al nivel de Fermi adquiere energía suficiente para abandonar dicho estado energético. Una situación análoga tiene lugar en la superficie donde la energía mínima para extraer un electrón se conoce como **trabajo de salida**, \mathcal{W}_0 (típicamente el trabajo de salida en metales suele estar en torno a los 4 eV). De acuerdo con la Fig. 2.6-2 solo unos pocos electrones superan dicho umbral energético y pueden ser sustraídos de la superficie. Entre los diferentes mecanismos por medio de los cuales los electrones adquieren energía suficiente para escapar de la superficie metálica pueden distinguirse: la emisión por calentamiento de la superficie metálica (**emisión termoiónica**), emisión debida a la absorción de un fotón energético (**fotoemisión** o **emisión por efecto fotoeléctrico**), emisión producida por efecto campo (**emisión por efecto campo**), o bien, la emisión por impacto de iones y estados excitados sobre la superficie vía *mecanismo de Auger* (**emisión secundaria**). Este último suele ser el mecanismo dominante en la mayoría de las situaciones prácticas para las descargas.

Emisión termoiónica

Como es conocido, el proceso de emisión termoiónica se refiere a la emisión electrónica que tiene lugar en un electrodo cuando éste se calienta. La densidad de corriente emitida puede expresarse conforme a la **ecuación de Richardson-Dushman**

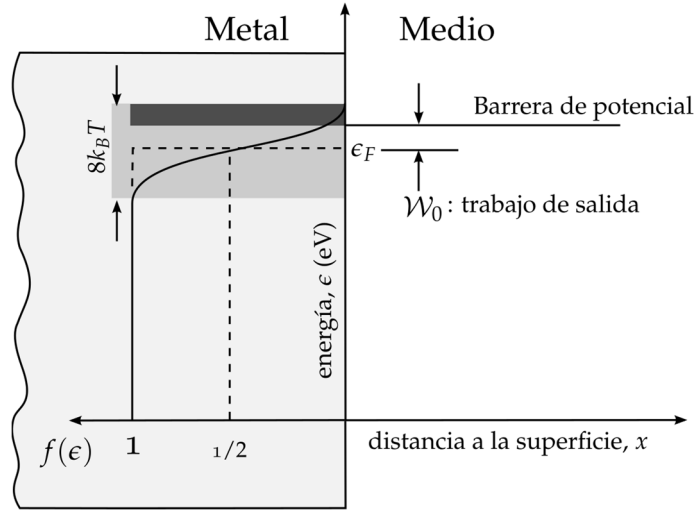


Fig. 2.6-2: Esquema representativo de la proporción de electrones que poseen energía suficiente para abandonar el metal. En la figura esta población se ha sombreado con una banda más oscura en la representación energética.

$$j = AT^2 e^{-\mathcal{W}_0/k_B T}, \tag{2.6.2}$$

donde T representa la temperatura del cátodo en Kelvins, \mathcal{W}_0 el trabajo de salida del metal y A es la constante de Richardson

$$A = \frac{4\pi m_e k_B e}{h^3} = 1.20173 \times 10^6 \left[\frac{\text{A}}{\text{m}^2 \text{K}^2} \right]. \tag{2.6.3}$$

La relación (2.6.2) tiene una dependencia inversa con la temperatura en la parte exponencial por lo que para obtener densidades de corriente apreciables, el cátodo debe calentarse a temperaturas relativamente elevadas. Para obtener una estimación del papel de la temperatura basta considerar los órdenes de magnitud ($\mathcal{W}_0 \sim 1 \text{ eV}$, $k_B \sim 10^{-4} \text{ eV/K}$)

$$\begin{aligned} T \sim 10^2 \text{ K} & \quad j \sim 10^{-34} \frac{\text{A}}{\text{m}^2}, \\ T \sim 10^3 \text{ K} & \quad j \sim 10^7 \frac{\text{A}}{\text{m}^2}. \end{aligned} \tag{2.6.4}$$

Dado que en una configuración punta-plano el diámetro de la punta suele ser $\varnothing \sim 10^{-3} \text{ m}$, y considerando que solo está a expuesta al volumen de la descarga la mitad de la superficie ($A \sim 6 \times 10^{-6} \text{ m}^2$), se deduce de la aproximación (2.6.4) corrientes del orden de $i_{10^2 \text{ K}} \sim 10^{-28} \text{ A}$ y $i_{10^3 \text{ K}} \sim 10 \text{ A}$. Por tanto, el efecto termoiónico solo es significativo a altas temperaturas o bien si existe un calentamiento del cátodo como es el caso de los arcos.

Fotoemisión (efecto fotoeléctrico)

La emisión de electrones en el cátodo por efecto fotoeléctrico puede describirse por medio de la relación “clásica”

$$\epsilon_e = h\nu - \mathcal{W}_0. \quad \langle 2.6.5 \rangle$$

En el contexto de las descargas puede producirse una amplia variedad de estados excitados, y la relajación de éstos conduce en la mayoría de los casos a la emisión de un fotón. Como se deduce de $\langle 2.6.5 \rangle$, de un lado, fijada una frecuencia, la densidad de corriente fotoemitida depende linealmente con la intensidad de la luz que alcanza la superficie (número de fotones que alcanza el electrodo por unidad de tiempo y área). Y, por otra parte, la densidad de corriente aumenta con la frecuencia de la luz.

Para estimar el papel de la fotoemisión en las descargas basta considerar los órdenes de magnitud ($\mathcal{W}_0 \sim 1 \text{ eV}$, $h \sim 10^{-15} \text{ eV/s}$, $c \sim 10^8 \text{ m/s}$):

$$\nu_0 \sim 10^{15} \text{ Hz} \rightarrow \lambda_0 \sim 10 \text{ nm}. \quad \langle 2.6.6 \rangle$$

En la práctica, como consecuencia de la actividad/relajación de los estados excitados producidos durante la descarga se emite luz continuamente a frecuencias del este orden e incluso superiores. Precisamente este hecho hace que sea difícil cuantificar papel de la fotoemisión en las descargas ya que depende del material del electrodo así como del factor de transmisión de luz en el plasma. Este último asociado al tipo de gas, presión, etc.

Emisión por efecto campo

A diferencia de la emisión termoiónica o la fotoemisión, en la emisión por efecto campo no se requiere superar el umbral energético, \mathcal{W}_0 , para sustraer electrones de la superficie. Esto es debido a la presencia de un campo eléctrico suficientemente intenso en las proximidades del electrodo que “deforma” la barrera de potencial (véase Fig. 2.6-3) dándole un aspecto “más puntiagudo”. En estas circunstancias parte de los electrones superficiales pueden superar la barrera de potencial por *efecto túnel*.

La densidad de corriente emitida por efecto campo puede expresarse por medio de la relación de **Fowler-Nordheim**²³

$$j = A_{FN} E^2 e^{-B_{FN}/E}, \quad \langle 2.6.7 \rangle$$

donde,

$$A_{FN} = \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar \omega_0}, \quad B_{FN} = \frac{4}{3} \sqrt{|e|} \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}} \omega_0^{3/2}.$$

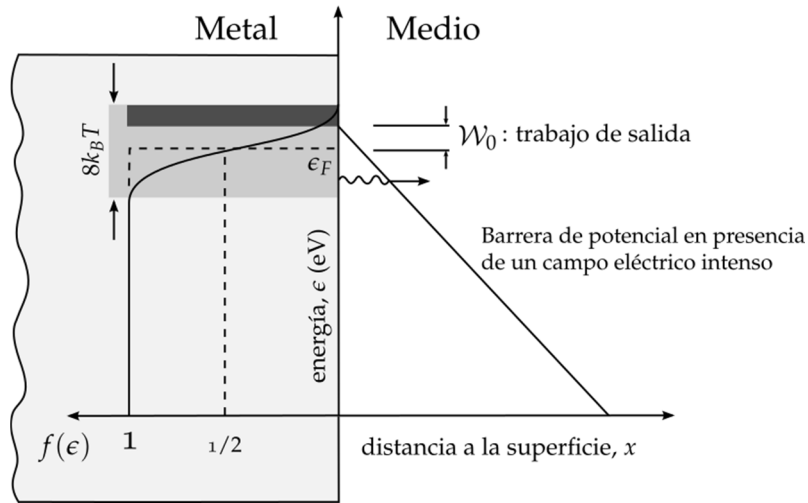


Fig. 2.6-3: Esquema representativo de la deformación de la barrera de potencial en presencia de un campo eléctrico suficientemente intenso. Esta deformación suele tener lugar en una banda de unos pocos radios atómicos, lo que posibilita el escape de electrones vía efecto túnel.

En el caso de la descarga corona en configuración punta-plano, típicamente el diámetro de la punta es del orden de milímetros, $\varnothing = 10^{-3}$ m, por lo que de acuerdo con (2.6.7) se requieren campos en la superficie metálica del orden de 10^8 V/m para producir corrientes significativas, comprendidas entre μA y A.

Por tanto, en general, la emisión por efecto campo no constituye una contribución notable a la emisión secundaria, con la excepción de aquellos casos en la que los electrodos están relativamente cerca ($\sim 1 \mu\text{m}$) y la presión es baja (~ 1 Torr).

Emisión secundaria

El concepto de emisión secundaria alude a la emisión electrónica por impacto de las partículas que colisionan con la superficie metálica (iones, estados excitados, estados metaestables, electrones). En general suele caracterizarse por el coeficiente γ , que representa la razón entre el número de electrones emitidos por partículas incidentes

$$\gamma = \frac{\# e \text{ emitidos}}{\# \text{ part. incidentes}}. \quad (2.6.8)$$

Este coeficiente puede interpretarse como la probabilidad de emisión por impacto. En el contexto de las descargas, el proceso de emisión secundaria dominante es el inducido por el impacto de los iones positivos sobre la superficie del cátodo. Aunque de menor importancia, también puede ser

significativa la emisión estimulada por el impacto de estados excitados o metaestables.

Emisión secundaria estimulada por impacto iónico

1. Transferencia energética vía colisión binaria

El proceso que parece más intuitivo es la colisión entre el ion que proviene del volumen de la descarga y el electrón de superficie. Sin embargo, a través de este proceso la posibilidad de que un electrón escape es completamente remota. Para hacer una estimación de este proceso se considera el electrón de superficie con energía ϵ_F . La máxima energía transferida en una colisión elástica viene dada por la expresión

$$\Delta\epsilon \approx 2m_e v_i (v_i + v_F), \quad (m_i \gg m_e) \quad \langle 2.6.9 \rangle$$

donde v_i y v_F representan las velocidades del ion y del electrón, respectivamente. De este modo, a partir de la condición $\Delta\epsilon = \mathcal{W}_0$, puede fijarse el umbral de velocidad para que los iones puedan sustraer un electrón:

$$v_i^* = \frac{1}{2} \left[-v_F + \sqrt{v_F^2 + \frac{2\mathcal{W}_0}{m_e}} \right]. \quad \langle 2.6.10 \rangle$$

Tomando $\mathcal{W}_0 \sim 1$ eV, $v_F \sim 10^6$ m/s y $m_e \sim 10^{-30}$ kg, se obtiene

$$v_i^* \sim 10^6 \text{ m/s}. \quad \langle 2.6.11 \rangle$$

Con la referencia de la masa de una molécula de aire, $m_i \sim 10^{-26}$ kg, de $\langle 2.6.10 \rangle$ se deduce que la energía de los iones sería: $\epsilon_i \sim 10^4$ eV. Sin embargo en el contexto de la descargas este tipo de situaciones son imposibles dado que la energía con la que se trabaja, en la mayoría de los casos, es la necesaria para que un electrón produzca la ionización de las moléculas del medio, por lo que suele estar comprendida entre $(10^1 - 10^2)$ eV. De hecho, en la mayoría de las situaciones, la temperatura de los iones en las descargas es del mismo orden que temperatura del gas, por lo que es habitual asumir que la temperatura de estos es igual a la del medio.

2. Proceso de neutralización de Auger²⁴

Cuando un ion “lento” se aproxima a la superficie metálica, la energía de interacción eléctrica está confinada a una estrecha banda del orden de Ångstroms ($\sim 5\text{Å}$). Dado que la barrera de potencial es del orden de unos cuantos radios atómicos, algunos electrones con energías cercanas al nivel de Fermi podrán escapar por efecto túnel de la superficie metálica, quedando atrapados en el potencial de interacción ion-metal e interaccionando con el ion. En estas condiciones caben dos posibilidades: la neutralización o la

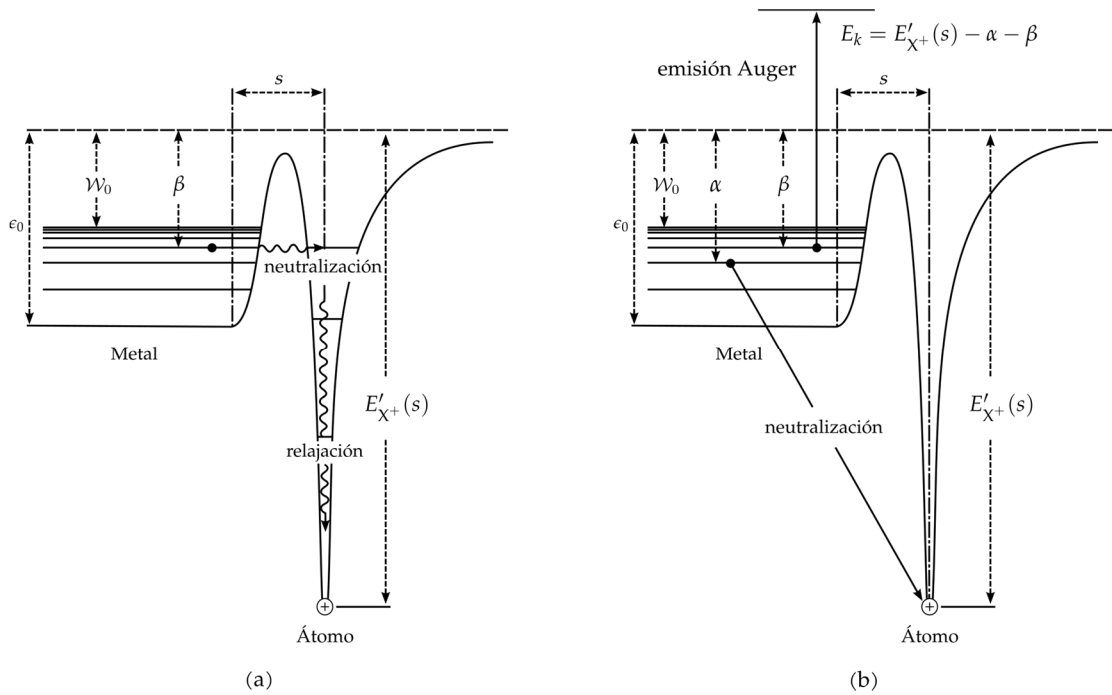
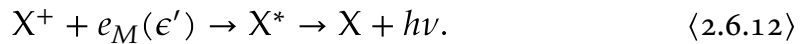


Fig. 2.6-4: Diagrama esquemático del proceso de neutralización de Auger que tiene lugar cuando un ion "lento" se aproxima a la superficie metálica: (a) neutralización; y (b) emisión secundaria.

emisión secundaria de un electrón.

En el primer caso (**neutralización**, véase Fig. 2.6-4-(a)) el electrón es capturado en uno de los estados excitados del ion positivo

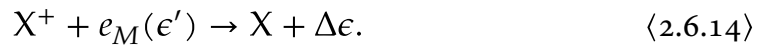


Este mecanismo conduce a un proceso de relajación en el que se emite un fotón de energía igual a

$$h\nu = E_{X^*} - E_X, \quad (2.6.13)$$

donde $E_{X^*} = E_{X^+} - e_M(\epsilon')$.

El segundo caso (**emisión secundaria**, véase Fig. 2.6-4-(b)) tiene lugar cuando el electrón sustraído es capturado por el estado fundamental del ion,



En estas circunstancias el defecto de energía

$$\Delta\epsilon = e_M(\epsilon') + E_{X^+} - E_X. \quad (2.6.15)$$

puede ser absorbido por un electrón secundario en el cátodo, y en caso de superar el trabajo de salida podrá abandonar la superficie metálica. Por este motivo la emisión secundaria vía mecanismo de Auger suele representarse

por la secuencia

$$X^+ + e_M(\epsilon') + e_M(\epsilon'') \rightarrow e(\epsilon_k) + X, \quad \langle 2.6.16 \rangle$$

donde $\epsilon' = \epsilon_0 - \alpha$, $\epsilon'' = \epsilon_0 - \beta$ y $\epsilon_k = \epsilon_0 + E_k$ (véase Fig. 2.6-4-(b)). De acuerdo con la Fig. 2.6-4-(b), la energía máxima con la que el electrón puede escapar del metal viene dada por la expresión

$$E_k^{\text{máx.}} = E'_{X^+}(s) - 2\omega_0 \quad \langle 2.6.17 \rangle$$

donde se hace uso de las relaciones derivadas de la conservación de la energía en $\langle 2.6.16 \rangle$, esto es,

$$\begin{aligned} \text{Inicial : } & E_{X^+-M} + E_{X^+} - \alpha - \beta \\ \text{Final : } & E_{X-M} + E_k \end{aligned} \quad \langle 2.6.18 \rangle$$

de las que se deduce que:

$$\begin{aligned} \epsilon' + \epsilon'' &= 2\epsilon = \epsilon_k + \epsilon_0 - E'_{X^+}(s), \\ E'_{X^+}(s) &= E_{X^+} + E_{X^+-M} - E_{X-M}, \end{aligned} \quad \langle 2.6.19 \rangle$$

siendo E_{X^+-M} y E_{X-M} las energía de interacción del ion y el átomo con la superficie metálica a una distancia s , respectivamente.

En la práctica la condición $\langle 2.6.17 \rangle$ suele utilizarse para definir la relación experimental del coeficiente γ^{25} (ec. $\langle 1.2.1 \rangle$).

Emisión secundaria estimulada por impacto de estados excitados

Los procesos de desexcitación vía mecanismos de Auger pueden describirse de un modo completamente análogo al proceso descrito en $\langle 2.6.12 \rangle$ (véase la referencia: Hagstrum²⁴). En estos casos, la secuencia puede reducirse a la relación

$$X^* + e_M(\epsilon'') \rightarrow e(\epsilon_k) + X. \quad \langle 2.6.20 \rangle$$

Este mecanismo, a diferencia del proceso de neutralización previo, conduce a la emisión secundaria de un electrón del metal. Un balance energético similar a $\langle 2.6.18 \rangle$ conduce a las relaciones:

$$\begin{aligned} \text{Inicial : } & E_{X^*-M} + E_{X^*} - \beta \\ \text{Final : } & E_{X-M} + E_k \end{aligned} \quad \langle 2.6.21 \rangle$$

de las que se deduce,

$$\begin{aligned} \epsilon'' &= \epsilon_k + \epsilon_0 - E'_{X^+}(s), \\ E'_{X^+}(s) &= E_{X^*} + E_{X^*-M} - E_{X-M}. \end{aligned} \quad \langle 2.6.22 \rangle$$

Luego, en este caso la energía cinética máxima con la que el electrón puede escapar del metal viene dada por la expresión:

$$E_k^{\text{máx.}} = E'_{X^*}(s) - \omega_0. \quad \langle 2.6.23 \rangle$$

Comparando $\langle 2.6.23 \rangle$ con $\langle 2.6.17 \rangle$ puede verse que el mecanismo de emisión secundaria por medio de la neutralización de un ion domina sobre la emisión secundaria estimulada por impacto de estados excitados. Una estimación de esta valoración puede hacerse despreciando la energía de interacción y considerando exclusivamente las energías: $E_{X^+} \sim 12 \text{ eV}$ y $E_{X^*} \sim (0.5,6) \text{ eV}$. Teniendo en cuenta que típicamente $\omega_0 \sim 4 \text{ eV}$, es claro que por medio de la emisión secundaria estimulada por impacto de estados excitados solo una pequeña proporción de los electrones en el metal consiguen abandonarlo. Por este motivo se considerará (véase §4.2) que el principal mecanismo para la emisión secundaria está determinado por la neutralización de los iones positivos en las proximidades del cátodo.

Bibliografía

1. Balescu, R. *Transport processes in plasmas. 1 Classical transport theory.* (Elsevier Science Publishers B.V., 1988).
2. Klages, R., Radons, G. & Sokolov, I. M. *Anomalous transport: foundations and applications.* (John Wiley & Sons, 2008).
3. Balescu, R. *Aspects of anomalous transport in plasmas.* (CRC Press, 2010).
4. Lebowitz, J. L. & Montroll, E. W. *Nonequilibrium Phenomena: The Boltzmann Equation.* (Elsevier Science Ltd, 1983).
5. Goldstein, H., Poole, C. & Safko, J. *Classical Mechanics.* (Addison Wesley, 2001).
6. Gantmájér, F. R. *Mecánica analítica.* (URRS, 2003).
7. Krall, N. A. & Trivelpiece, A. W. *Principles of plasma physics.* (McGraw-Hill, 1973).
8. Balescu, R. Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics. *NASA STIRecon Tech. Rep. A 76*, (1975).
9. Liboff, R. L. *Kinetic theory.* (Springer-Verlag, 2003).
10. Yvon, J. La théorie statistique des fluides et l'équation d'état. **203**, (Hermann & cie, 1935).
11. Bogoliubov, N. N. Problems of dynamical theory in statistical physics. *J PhysUSSR 10*, 256 (1946).
12. Born, M. & Green, H. S. A general kinetic theory of liquids. I. The molecular distribution functions. *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Sci.* **188**, 10–18 (1946).
13. Kirkwood, J. G. The statistical mechanical theory of transport processes I. General theory. *J. Chem. Phys.* **14**, 180–201 (1946).
14. Montgomery, D. C. & Tidman, D. A. *Plasma Kinetic Theory.* (McGraw-Hill, 1964).
15. Ichimaru, S. *Statistical Plasma Physics, Volume I: Basic Principles.* (Westview Press, 2008).
16. Mayer, J. E. & Mayer, M. G. *Statistical Mechanics of Fluids.* (Wiley, 1940).
17. Landau, L. D. & Lifshitz, E. M. *Statistical physics.* (Butterworth Heinemann, Oxford, 1991).
18. Dupree, T. H. Dynamics of Ionized Gases. *Phys. Fluids 4*, 696 (1961).
19. Ajiezer, A. I. & Peletminski, S. V. *Métodos de la Física Estadística.* (MIR, 1981).
20. Kirkwood, J. G. The statistical mechanical theory of transport processes II. Transport in gases. *J. Chem. Phys.* **15**, 72–76 (1947).
21. Grad, H. Note on N-dimensional hermite polynomials. *Commun. Pure Appl. Math.* **2**, 325–330 (1949).
22. Bhatnagar, P. L., Gross, E. P. & Krook, M. A Model for Collision Processes in

- Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Phys. Rev.* **94**, 511–525 (1954).
23. Fowler, R. H. & Nordheim, L. Electron Emission in Intense Electric Fields. *Proc. R. Soc. Lond. Math. Phys. Eng. Sci.* **119**, 173–181 (1928).
 24. Hagstrum, H. D. Theory of Auger Ejection Electrons of Electrons from Metal by Ions. *Phys. Rev.* **96**, 336–365 (1954).
 25. Raizer, Y. P. *Gas Discharges Physics*. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991).

el Método:
FEM

El método: FEM

Capítulo

3

“Experience is what you get when you don't get what you want.”

DAN STANFORD

Contenido

3.1	Introducción	55
3.2	El método de los residuos ponderados	57
	Equivalencia entre las ecuaciones diferenciales y la formulación débil—57	
	Formulación Bubnov-Galerkin (método de Galerkin)—59	
	Formulación matricial—59	
3.3	El problema de convección-difusión	62
	Representación estándar—62	
	Representación autoadjunta—65	
	Stream Upwind Petrov-Galerkin (SUPG)—66	
3.4	Discretización temporal	69
	El algoritmo—70	
3.5	Precisión y Estabilidad	72
3.6	Un test numérico	76
3.7	Algunas conclusiones finales	83
	Bibliografía	85

3.1 Introducción

La estrategia natural cuando se abordan sistemas complejos (aquellos que no admiten una simplificación extrema como para poder reducir su comportamiento a pocos grados de libertad) consiste en interpretar el comportamiento de éstos a través de sus partes elementales (**elementos**). La

esperanza de este planteamiento radica en dos aspectos fundamentales: el hecho de que el grado de complejidad del comportamiento de estos elementos sea ínfimo en comparación con el del problema global, y la posibilidad de reconstruir la dinámica del sistema como un todo a partir del **ensamblaje** de las partes.

Históricamente, el método de los elementos finitos nace con los trabajos de Lord Rayleigh¹ (1870) y W. Ritz² (1909) en el contexto de métodos basados en principios variacionales. Posteriormente, el trabajo de B. Galerkin³ (1915) supuso una generalización del método para operadores que admitían una formulación funcional o bien que permitían una *formulación débil*. En 1943 Courant⁴ hizo una contribución significativa al método de Ritz usando funciones continuas definidas por secciones. Algunos años más tarde (1956), Clough⁵ desarrolló un método idéntico al usado por Courant para estudiar la rigidez y flexión de estructuras complejas. Fue entonces cuando Clough⁶ introdujo el concepto de **elemento finito**.

En la actualidad existen multitud de herramientas de cálculo basadas en este método. En este trabajo se ha utilizado el software Comsol Multiphysics para implementar las ecuaciones de la aproximación fluida en el ámbito de las descargas eléctricas. En particular, se ha hecho uso del módulo de ecuaciones matemáticas en formulación débil, con la intención de controlar todos los aspectos de estabilidad del esquema numérico. Desde luego, una discusión detallada del método de elementos finitos (FEM) va más allá de los objetivos de este trabajo, aunque merece la pena explorar las dificultades numéricas asociadas a la **representación estándar** en problemas de transporte. En este sentido, toda la atención se centra en el *diseño* de las **funciones de forma** y técnicas de **discretización temporal**. De hecho, en estos dos puntos se concentra la mayor parte del *factor humano* en el desarrollo del método.

A lo largo de este capítulo se presenta la formulación *streamline upwind Petrov–Galerkin*⁷ (SUPG) como una alternativa para evitar las inestabilidades introducidas por la formulación estándar en problemas de convección dominante. No obstante, en problemas transitorios, la difusión artificial introducida por esta técnica puede llegar a ser excesiva sin un refinamiento adecuado de la malla. Para evitar este efecto de *suavizado* continuo de la solución se introduce, en el ámbito de la discretización temporal, una representación que combina los efectos de una descripción implícita y explícita (ϑ -method^{8–10}). El resultado de esta derivada temporal promediada permite construir esquemas de alta resolución basados en el concepto de limitadores, originalmente desarrollado por Van Leer^{11,12} y Boris-Book^{13,14}. En este escenario, se aprovechan las características de un esquema $\vartheta = 1/2$ (Crank-Nicholson –CN–), ya que no producen amortiguación alguna en la

solución. Sin embargo, la imposibilidad de amortiguar los posibles errores numéricos conduce a inestabilidades, a menos que la evolución sea *suficientemente suave*^a. Por este motivo, se construye un esquema híbrido, CN+SUPG, que permite filtrar la región de altas frecuencias asociadas a fuertes gradientes o discontinuidades.

En la parte final del capítulo, para testear la bondad del esquema numérico se analiza el problema de la descarga corona (R. Morrow¹⁵) y se comparan los resultados con los originales, obtenidos por medio de un esquema de alta resolución (*flux-corrected transport*¹³ -FCT-) en diferencias finitas (FD). Se introduce entonces el efecto de los términos de reacción en la estabilidad del esquema, y se analiza el papel de la discretización temporal sobre la base de un análisis espectral del error^{16,17} (J. Von Neumann).

3.2 El método de los residuos ponderados

Equivalencia entre las ecuaciones diferenciales y la formulación débil

La ecuación diferencial que caracteriza un problema de convección-difusión-reacción (CDR) viene dada por la expresión:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla n - \nabla \cdot (D\nabla n) &= Q, & \forall \mathbf{r} \in \Omega \\ n(\mathbf{r}, t = 0) &= n_0(\mathbf{r}), & \forall \mathbf{r} \in \Omega \\ n &= n_p, & \forall \mathbf{r} \in \Gamma_D \\ D\nabla n \cdot \mathbf{n}_s &= f_p, & \forall \mathbf{r} \in \Gamma_N \end{aligned} \right\} \quad \langle 3.2.1 \rangle$$

Formulación fuerte

donde \mathbf{n}_s representa el vector normal a la superficie, apuntando desde el volumen (dominio) del problema hacia la superficie; mientras que Ω define el interior del dominio en cuestión; y $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ la frontera del mismo.

Sea $n(\mathbf{r}, t)$ la solución de $\langle 3.2.1 \rangle$, y w una función arbitraria (*suficientemente regular*) tal que:

$$w(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{r} \in \Gamma_D,$$

entonces, un planteamiento en residuos ponderado de $\langle 3.2.1 \rangle$ y su posterior integración por partes conducen a la expresión:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} w \cdot (n_t + \mathbf{u} \cdot \nabla n) d\mathbf{r} + \int_{\Omega} (\nabla w) \cdot (D\nabla n) d\mathbf{r} \\ = \int_{\Omega} w \cdot Q d\mathbf{r} + \int_{\Gamma_N} w \cdot f_p dS. \end{aligned} \quad \langle 3.2.2 \rangle$$

^a En la inmensa mayoría de las ocasiones se requerirían pasos de tiempo inasumibles en relación a la escala de tiempo de problema.

En estas condiciones, el problema variacional asociado a (3.2.1) puede expresarse como sigue:

Formulación débil

$$n \in \mathcal{S}, \forall \omega \in \mathcal{U} : a(\omega, n) = l(\omega), \quad (3.2.3)$$

junto con la relación para $t = 0$

$$(\omega, n - n_0)|_{t=0} = 0, \quad (3.2.4)$$

donde

$$\begin{aligned} a(\omega, n) &:= (\omega, n_t + \mathbf{u} \cdot \nabla n) + (\nabla \omega, \mathcal{D} \nabla n), \\ l(\omega) &:= (\omega, Q) + (\omega, f_p)_{\Gamma_N}, \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

adoptando así la notación estándar, en la que (\cdot, \cdot) y $(\cdot, \cdot)_{\Gamma_N}$ denotan los productos internos $L^2(\Omega)$ y $L^2(\Gamma_N)$, respectivamente.

Los espacios \mathcal{S} y \mathcal{U} (ec. (3.2.3)) representan el conjunto de funciones y variaciones admisibles, respectivamente, y vienen dados por las relaciones:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &\equiv \{n(\mathbf{r}, t) : \text{para cada } t \in [0, t], n \in H^1(\Omega) \text{ con } n(\Gamma_D) = n_p\} \\ \mathcal{U} &\equiv \{\omega : \omega \in H^1(\Omega), \omega(\Gamma_D) = 0\} \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

siendo $H^1(\Omega)$ el espacio de Sobolev de grado 1 y orden 2

$$H^1(\Omega) \equiv \left\{ \phi : \phi \in L^2(\Omega), \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2, 3 \right\}, \quad (3.2.7)$$

es decir, donde tanto las funciones como sus derivadas primeras son funciones de cuadrado integrable sobre el dominio (Ω) , esto es,

$$\int_{\Omega} |\phi|^2 d\mathbf{r} < \infty, \quad \int_{\Omega} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right|^2 d\mathbf{r} < \infty.$$

NOTAS:

1. El concepto de formulación variacional en (3.2.3) surge de la posibilidad de *variar* arbitrariamente la función ω . Por otra parte, la interpretación de formulación *débil* se debe a que los requisitos sobre la clase de funciones n que satisfacen (3.2.2) ó (3.2.3) son más *débiles* que para el caso de (3.2.1). En particular en (3.2.1), $n \in C^2(\Omega)$ (funciones con derivada segunda continua), mientras que en la relación débil (3.2.3), $n \in C^1(\Omega)$.
2. En (3.2.6), \mathcal{S} define el **espacio de soluciones** donde las condiciones de contorno de tipo Dirichlet aparecen explícitamente. Es por esto que a menudo este tipo de condiciones se denominan **forzadas** o **esenciales**. Por otra parte, las condiciones de contorno de tipo Neumann quedan

integradas implícitamente en la formulación débil, de ahí que aparezcan como condiciones **naturales**.

3. La relación <3.2.6> también define el **espacio de variaciones** \mathcal{U} , donde se utiliza $\bar{\Omega}$ como la región que encierra el problema, definida a partir de la unión de su interior (Ω) con la frontera correspondiente ($\partial\Omega$)

$$\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega.$$

4. A diferencia de la formulación fuerte, donde la ecuación diferencial preserva su carácter local, en la formulación débil la ecuación diferencial solo se satisface en promedio sobre el volumen Ω .

Formulación Bubnov-Galerkin (método de Galerkin)

El primer paso en esta formulación es la construcción de los subespacios \mathcal{S}^h y \mathcal{U}^h , que representan sendas aproximaciones de dimensión finita de los espacios funcionales \mathcal{S} y \mathcal{U} , respectivamente

$$\mathcal{S}^h \subset \mathcal{S}, \quad \mathcal{U}^h \subset \mathcal{U}, \quad \langle 3.2.8 \rangle$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^h &\equiv \{n^h \in C^k(\Omega) : n^h \in \mathcal{D}^k, n^h(\Gamma_D) = n_p\}, \\ \mathcal{U}^h &\equiv \{w^h \in C^k(\Omega) : w^h \in \mathcal{D}^k, w^h(\Gamma_D) = 0\}, \end{aligned} \quad \langle 3.2.9 \rangle$$

siendo \mathcal{D}^k , el espacio de los polinomios de grado k .

La esencia del método de Galerkin reside en construir las funciones de \mathcal{S}^h a partir de los elementos de \mathcal{U}^h , esto es,

$$n^h = w^h + n_p^h. \quad \langle 3.2.10 \rangle$$

De acuerdo con <3.2.10>, la formulación débil <3.2.3> puede reescribirse en términos de los espacios aproximados:

$$\begin{aligned} &\int_{\Omega} w^h [w_t + \mathbf{u} \cdot \nabla w^h] d\mathbf{r} + \int_{\Omega} \nabla w^h [D\nabla w^h] d\mathbf{r} \\ &+ \int_{\Omega} w^h [(n_p^h)_t + \mathbf{u} \cdot \nabla n_p^h] d\mathbf{r} + \int_{\Omega} \nabla w^h [D\nabla n_p^h] d\mathbf{r} \\ &= \int_{\Omega} w^h Q d\mathbf{r} + \int_{\Gamma_N} w^h f_p dS. \end{aligned} \quad \langle 3.2.11 \rangle$$

Formulación matricial

En la práctica el método de Galerkin se traslada a cada uno de los elementos que componen la discretización espacial del problema. De este modo para una partición \mathcal{T}^h , consistente en M_E elementos tales que:

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{M_E} \bar{\Omega}_e, \quad \bigcap_{e=1}^{M_E} \Omega_e = \emptyset, \quad \langle 3.2.12 \rangle$$

los subespacios aproximados se definen como sigue

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^h &\equiv \left\{ n^h \in C^0(\Omega) : n^h|_{\Omega_e} \in \mathcal{D}^k \quad \forall \Omega_e, n^h(\Gamma_D) = n_p \right\}, \\ \mathcal{U}^h &\equiv \left\{ w^h \in C^0(\Omega) : w^h|_{\Omega_e} \in \mathcal{D}^k \quad \forall \Omega_e, w^h(\Gamma_D) = 0 \right\}. \end{aligned} \quad \langle 3.2.13 \rangle$$

De acuerdo con $\langle 3.2.11 \rangle$, para obtener un sistema de ecuaciones algebraicas se requiere especificar la estructura del subespacio \mathcal{U}^h . Una vez definidas las **funciones base** o **funciones de forma** de dicho espacio, la aproximación de la función de variación puede construirse a partir del problema de interpolación^b

$$w^h = \sum_{i=1}^{M-1} N_i \tilde{w}_i, \quad \langle 3.2.14 \rangle$$

donde M representa el número total de nodos, N_i las funciones de forma o interpolación (cumpliendo que $N_i(\mathbf{r}_j) = \delta_{ij}$) y \tilde{w}_i los valores nodales correspondientes (**representación estándar**)

$$\tilde{w}_i = w(\mathbf{r}_i). \quad \langle 3.2.15 \rangle$$

En el caso particular en el que las funciones de forma pertenecen al espacio \mathcal{P}^1 , se obtienen las conocidas *hat functions* (Fig. 3.2-1).

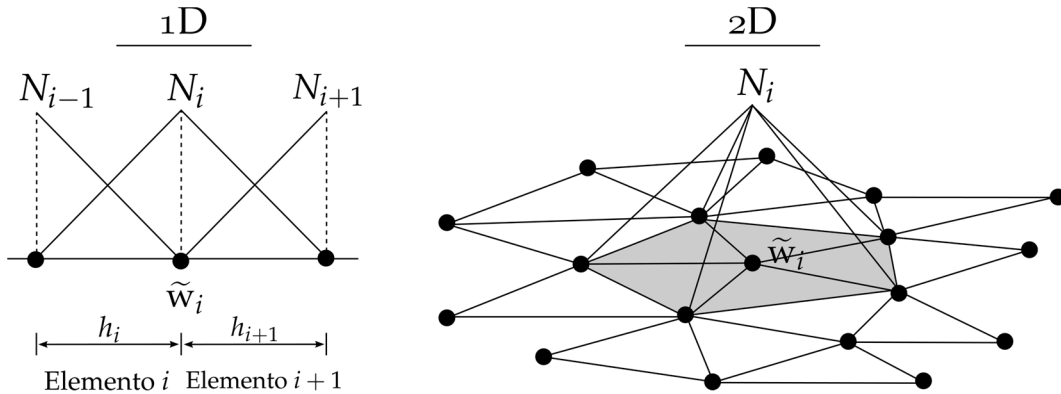


Fig. 3.2-1: Representación esquemática de las *hat functions*.

^b Por sencillez se adopta, de manera simbólica, la notación para el problema 1D donde se interpreta: $\Gamma_D \rightarrow x = L$ y $\Gamma_N \rightarrow x = 0$. De este modo se evita la tarea de sustraer los índices activos en la matriz resultante, distinguiéndolos de aquellos definidos por una condición esencial.

Utilizando $\langle 3.2.14 \rangle^c$ sobre $\langle 3.2.11 \rangle$ se obtiene

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^{M-1} N_i \tilde{w}_i \right) \left[\sum_{j=1}^{M-1} N_j \tilde{w}_j + \mathbf{u} \cdot \sum_{j=1}^{M-1} \nabla N_j \tilde{w}_j \right] d\mathbf{r} \\
& + \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^{M-1} \nabla N_i \tilde{w}_i \right) \cdot \left(\mathcal{D} \sum_{j=1}^{M-1} \nabla N_j \tilde{w}_j \right) d\mathbf{r} \\
& + \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^{M-1} N_i \tilde{w}_i \right) [N_M \dot{n}_p + \mathbf{u} \cdot \nabla N_M n_p] d\mathbf{r} \quad \langle 3.2.16 \rangle \\
& + \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^{M-1} \nabla N_i \tilde{w}_i \right) \cdot (\mathcal{D} \nabla N_M n_p) d\mathbf{r} \\
& = \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^{M-1} N_i \tilde{w}_i \right) Q d\mathbf{r} + \int_{\Omega} \left(\sum_{i=1}^{M-1} N_i \tilde{w}_i \right) f_p dS.
\end{aligned}$$

La relación $\langle 3.2.16 \rangle$ puede reorganizarse para obtener una expresión nodal,

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{M-1} \tilde{w}_i \left[\sum_{j=1}^{M-1} \left(\int_{\Omega} N_i N_j d\mathbf{r} \right) \tilde{w}_j + \left(\int_{\Omega} N_i N_M d\mathbf{r} \right) \dot{n}_p \right. \\
& + \sum_{j=1}^{M-1} \left(\int_{\Omega} N_i \mathbf{u} \cdot \nabla N_j d\mathbf{r} \right) \tilde{w}_j \\
& + \left(\int_{\Omega} N_i \mathbf{u} \cdot \nabla N_M d\mathbf{r} \right) n_p \\
& + \sum_{j=1}^{M-1} \left[\int_{\Omega} \nabla N_i \cdot (\mathcal{D} \nabla N_j) d\mathbf{r} \right] \tilde{w}_j \\
& \left. + \left[\int_{\Omega} \nabla N_i \cdot (\mathcal{D} \nabla N_M) d\mathbf{r} \right] n_p \right] \\
& = \sum_{i=1}^{M-1} \tilde{w}_i \left[\int_{\Omega} N_i Q d\mathbf{r} + \int_{\Gamma_N} N_i f_p dS \right], \quad \langle 3.2.17 \rangle
\end{aligned}$$

de donde se deduce finalmente la **ecuación semidiscreta**⁹:

$$\sum_{j=1}^{M-1} [\mathbf{M}_{ij} \tilde{w}_j + \mathbf{K}_{ij} \tilde{w}_j] = \mathbf{F}_i \quad (i = 1, \dots, N_n - 1), \quad \langle 3.2.18 \rangle$$

^c Puesto que tanto $\langle 3.2.10 \rangle$ como $\langle 3.2.11 \rangle$ requieren definir la condición esencial además de las funciones de variación o test, se utiliza que:

$$n_p^h = n_p N_M.$$

donde^d

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}_{ij} &= \int_{\Omega} N_i N_j d\mathbf{r}, \\
 \mathbf{K}_{ij} &= \int_{\Omega} N_i \mathbf{u} \cdot \nabla N_j d\mathbf{r} + \int_{\Omega} \nabla N_i \cdot (\mathcal{D} \nabla N_j) d\mathbf{r}, \\
 \mathbf{F}_i &= - \left[\left(\int_{\Omega} N_i N_M d\mathbf{r} \right) \dot{n}_p + \left(\int_{\Omega} N_i \mathbf{u} \cdot \nabla N_M d\mathbf{r} \right) n_p \right. \\
 &\quad \left. + \left(\int_{\Omega} \nabla N_i \cdot (\mathcal{D} \nabla N_M) d\mathbf{r} \right) n_p \right] \\
 &\quad + \int_{\Omega} N_i Q d\mathbf{r} + \int_{\Gamma_N} f_p N_i dS.
 \end{aligned} \tag{3.2.19}$$

3.3 El problema de convección-difusión

A partir de la estimación del error en problemas de difusión dominante se deduce que el método de Galerkin es óptimo (minimiza el residuo) en la norma de energía^{18,19}. Sin embargo, en problemas de transporte donde los términos de convección son significativos o dominantes, este método se vuelve inestable exhibiendo oscilaciones en presencia de discontinuidades o fuertes gradientes. En la mayoría de las ocasiones este efecto termina distorsionando por completo la solución del problema. Para entender la naturaleza de este comportamiento es necesario analizar la ecuación nodal correspondiente.

Representación estándar

Para simplificar el desarrollo del análisis se considera el caso 1D, adoptando los polinomios de Lagrange de grado 1 (\mathcal{P}^1) como funciones de forma. Así mismo se utilizan condiciones naturales para mostrar la inestabilidad inherente al método. En estas condiciones, la formulación fuerte del problema viene dada por la expresión:

$$\begin{aligned}
 - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D} \frac{\partial n}{\partial x} \right) + u \frac{\partial n}{\partial x} &= Q(x) \quad \forall x \in (0, L), \\
 \mathcal{D} \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{\Gamma} &= 0 \quad \Gamma \equiv \{0\} \cup \{L\}.
 \end{aligned} \tag{3.3.1}$$

Para construir las funciones de forma se utiliza la partición $0 = x_0 < x_1 <$

^d Las matrices \mathbf{M} y \mathbf{K} son conocidas como matriz de amortiguamiento (*damping matrix*) y matriz de rigidez (*stiffness matrix*), respectivamente, en alusión al origen del método de los elementos finitos en el contexto del análisis de estructuras en el campo de la ingeniería. Así mismo, el vector \mathbf{F} se conoce como vector de carga (*load vector*).

$x_2 \dots < x_n = L$, sobre la que se impone:

1. $N_i \in C^0[0, L]$.
2. $N_i|_{[x_{i-1}, x_i]}$ son polinomios de Lagrange de grado 1 (*hat functions*)

$$N_i = \begin{cases} (x - x_{i-1})/h_i & \text{si } x \in I_i = [x_{i-1}, x_i] \\ (x_{i+1} - x)/h_{i+1} & \text{si } x \in I_{i+1} = [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{si } x \notin I_i \cup I_{i+1} \end{cases}$$
3. $N_i(\Gamma) = 0$, donde $\Gamma \equiv \{0\} \cup \{L\}$.
4. $N_i(x_j) = \delta_{ij}$ (delta de Kronecker).

Finalmente, a partir de (3.2.18) puede establecerse la ecuación para un nodo interno correspondiente a la formulación débil,

$$\sum_{j=1}^M \mathbf{K}_{ij} \tilde{w}_j = \mathbf{F}_i, \quad (3.3.2)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{ij} &= \int_0^L N_i u \frac{\partial N_j}{\partial x} dx + \int_0^L \frac{\partial N_i}{\partial x} \left(\mathcal{D} \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) dx \\ &= \begin{cases} -\frac{u_i}{2} - \frac{\mathcal{D}_i}{h_i} & \text{si } j = i - 1 \\ \frac{u_i - u_{i+1}}{2} + \left(\frac{\mathcal{D}_i}{h_i} + \frac{\mathcal{D}_{i+1}}{h_{i+1}} \right) & \text{si } j = i \\ \frac{u_{i+1}}{2} - \frac{\mathcal{D}_{i+1}}{h_{i+1}} & \text{si } j = i + 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

y

$$\mathbf{F}_i = \int_0^L N_i Q dx = \frac{Q_i h_i}{2} + \frac{Q_{i+1} h_{i+1}}{2}. \quad (3.3.4)$$

Como resultado de (3.3.3) y (3.3.4), la ecuación para un nodo interno resulta^e:

$$-(\text{Pe} + 1) \tilde{w}_{i-1} + 2 \tilde{w}_i + (\text{Pe} - 1) \tilde{w}_{i+1} = \frac{Q h^2}{\mathcal{D}}, \quad (3.3.5)$$

donde

$$\text{Pe} = \frac{uh}{2\mathcal{D}}, \quad (3.3.6)$$

^e Por sencillez se considera el caso en el que tanto los coeficientes de transporte, u y \mathcal{D} , como la distribución de la malla varían suavemente en el dominio. Se asume entonces que estos coeficientes toman valores aproximadamente constantes entre nodos.

define el **número de Reynolds de la celda** (en ocasiones denominado **número de Péclet** cuando el coeficiente de difusión no representa una viscosidad cinemática). La expresión <3.3.5> puede resolverse siguiendo el **método del modo normal** desarrollado por Godunov y Ryabenkii^{20,21} (1964) para resolver de problemas estacionarios en diferencias finitas (FD). La esencia de este método consiste en buscar soluciones de la forma:

$$\tilde{w}_i = k^i. \tag{3.3.7}$$

Como resultado de aplicar <3.3.7> sobre <3.3.5> se obtiene una ecuación cuadrática con la forma:

$$(Pe + 1) - 2k + (1 - Pe)k^2 = 0, \tag{3.3.8}$$

donde se ha despreciado el efecto del término de la derecha en <3.3.5>. Las raíces de <3.3.8> resultan

$$k_1 = 1, \quad k_2 = \frac{1 + Pe}{1 - Pe}, \tag{3.3.9}$$

y con ello la solución de <3.3.5> viene dada por la expresión

$$\tilde{w}_i = C_1 + C_2 \left(\frac{1 + Pe}{1 - Pe} \right)^i. \tag{3.3.10}$$

Esta relación manifiesta la inestabilidad inherente a la representación estándar para $Pe > 1$, dado que el valor de \tilde{w}_i **depende de la paridad nodal**.

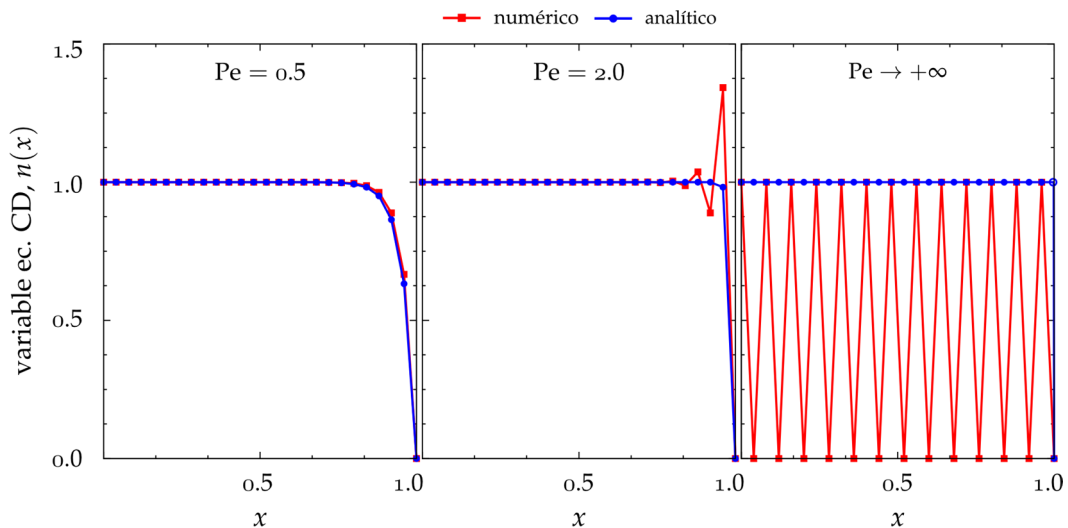


Fig. 3.3-1: Inestabilidad introducida por la representación estándar en problemas de convección dominante. Se muestran los resultados del problema: $un_x - \mathcal{D}n_{xx} = 0$, con $n(0) = 1$ y $n(1) = 0$, para diferentes Pe .

El efecto de estas oscilaciones en problema de convección dominante puede llegar a distorsionar por completo la solución del problema (véase Fig. 3.3-1).

Representación autoadjunta

Como hemos visto en la sección precedente (ec. (3.3.3)), la formulación estándar conduce a matrices de *rigidez* simétricas, en problemas de difusión. Además, también se ha hecho hincapié en que, en esas condiciones, el método de Galerkin (formulación estándar) es óptimo en la norma de energía^{18,19}. Sin embargo, cuando los términos de convección son significativos esta representación conduce a inestabilidades. Surge entonces la cuestión de si las funciones de variación/peso pueden definirse de tal forma que desaparezca la asimetría introducida por los términos de convección. Para ello es posible multiplicar la formulación débil por una función de “*buen comportamiento*”, $\pi(x)$,

$$\int_{\Omega} \pi(x)\omega(x) \left[-\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D} \frac{\partial n}{\partial x} \right) + u \frac{\partial n}{\partial x} - Q(x) \right] dx = 0, \quad (3.3.11)$$

donde ω está definida de acuerdo con (3.2.6). Resulta entonces la expresión

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \omega \frac{\partial n}{\partial x} \left(\pi u + \mathcal{D} \frac{\partial \pi}{\partial x} \right) dx + \int_{\Omega} \frac{\partial \omega}{\partial x} \pi \mathcal{D} \frac{\partial n}{\partial x} dx \\ - \int_{\Omega} \pi \omega Q dx = 0. \end{aligned} \quad (3.3.12)$$

Esta relación generará matrices simétricas cuando

$$\pi u + \mathcal{D} \frac{\partial \pi}{\partial x} = 0, \quad (3.3.13)$$

a partir de lo cual puede definirse la función π :

$$\pi(x) = C e^{-2Pe x/h}. \quad (3.3.14)$$

Utilizando la expresión (3.3.14) sobre (3.3.12), y haciendo uso de los subespacios aproximados, se obtiene la ecuación para un nodo interno

$$\begin{aligned} -\frac{2Pe(e^{2Pe} - 1)}{(e^{Pe} - e^{-Pe})^2} \tilde{w}_{i-1} + \frac{2Pe(e^{2Pe} - e^{-2Pe})}{(e^{Pe} - e^{-Pe})^2} \tilde{w}_{i-1} \\ - \frac{2Pe(1 - e^{-2Pe})}{(e^{Pe} - e^{-Pe})^2} \tilde{w}_{i+1} = \frac{Qh^2}{\mathcal{D}}. \end{aligned} \quad (3.3.15)$$

Como puede comprobarse, cuando $Pe > 1$, el nodo *aguas arriba* (\tilde{w}_{i-1}) está ponderado por exceso en comparación con la representación estándar. Del mismo modo, el nodo *aguas abajo* (\tilde{w}_{i+1}) se pondera por defecto en comparación con (3.3.5), por lo que **resulta un problema equivalente a una**

discretización de primer orden en FD para la parte convectiva. Por este motivo es de esperar que representación $\langle 3.3.15 \rangle$ sea más estable que su equivalente $\langle 3.3.5 \rangle$.

Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG)

Para entender la dificultades en la formulación estándar es posible establecer una equivalencia entre $\langle 3.3.5 \rangle$ y un esquema centrado en FD. Por otra parte, es un hecho conocido que las dificultades que surgen en estos últimos esquemas se deben al efecto del pesado simétrico de los nodos vecinos. Luego, parece que el primer paso para estabilizar el esquema pasa por romper la simetría de las funciones de variación/peso. Para ello es posible establecer una correspondencia con la representación autoadjunta, construyendo las **funciones de forma modificadas** en el subespacio aproximado \mathcal{U}^h de acuerdo con la expresión:

$$N_i^* = N_i + \frac{\alpha}{2} [\delta(x_i) - \delta(x_{i+1})], \quad \langle 3.3.16 \rangle$$

donde la función δ se define como sigue

$$\delta(x_i) = \begin{cases} 1 & x \in I_i, \\ 0 & x \notin I_i, \end{cases}$$

con $\mathcal{I}_i = [x_{i-1}, x_i]$. Utilizando ahora $\langle 3.3.16 \rangle$ para las funciones de peso en $\langle 3.3.1 \rangle$ se obtiene una ecuación nodal (para nodos internos) con la forma:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\mathcal{D}}{h} - \frac{u}{2}(1 + \alpha) \right] \tilde{w}_{i-1} + \left[\frac{2\mathcal{D}}{h} + u\alpha \right] \tilde{w}_i \\ + \left[-\frac{\mathcal{D}}{h} + \frac{u}{2}(1 - \alpha) \right] \tilde{w}_{i+1} = \frac{h}{2} (Q_i + \alpha), \end{aligned} \quad \langle 3.3.17 \rangle$$

o bien, en términos del número de Péclet (Pe)

$$\begin{aligned} -[\text{Pe}(1 + \alpha) + 1] \tilde{w}_{i-1} + 2[1 + \alpha\text{Pe}] \tilde{w}_i \\ + [\text{Pe}(1 - \alpha) - 1] \tilde{w}_{i+1} = \frac{h^2}{\mathcal{D}} (Q_i + \alpha). \end{aligned} \quad \langle 3.3.18 \rangle$$

Imponiendo la condición de igualdad entre $\langle 3.3.15 \rangle$ y $\langle 3.3.18 \rangle$, se obtiene

$$-[1 + \text{Pe}(1 + \alpha)] = -\frac{2\text{Pe}(e^{2\text{Pe}} - 1)}{(e^{\text{Pe}} - e^{-\text{Pe}})^2}, \quad \langle 3.3.19 \rangle$$

lo que conduce a la expresión óptima para el factor de peso α sobre N_i^* :

$$\alpha_{\text{óptimo}} = \coth(\text{Pe}) - \frac{1}{\text{Pe}}. \quad \langle 3.3.20 \rangle$$

Finalmente, a partir de (3.3.18) puede deducirse la estructura de las funciones de forma modificadas, dada la “similaridad” (en términos de molécula computacional^f) del término estabilizador con un término difusivo. Resulta, entonces,

$$N_i^* = N_i + \frac{\alpha h u}{2 |u|} \nabla N_i. \tag{3.3.21}$$

La Fig. 3.3-2 muestra el efecto del término estabilizador (3.3.21) en problemas de convección dominante, analizando el impacto del factor de peso α sobre el término estabilizador. Este factor α cuantifica en qué medida la redistribución de pesos, entre los nodos *aguas abajo* y *aguas arriba*, conduce a un término convectivo evaluado en la dirección del flujo (método *streamline upwind*, -SU-). El valor crítico para α puede deducirse a partir de (3.3.18), imponiendo la condición límite respecto de la influencia del nodo *aguas abajo* (\tilde{w}_{i+1}),

$$Pe(1 - \alpha) - 1 \geq 0, \tag{3.3.22}$$

de donde se obtiene

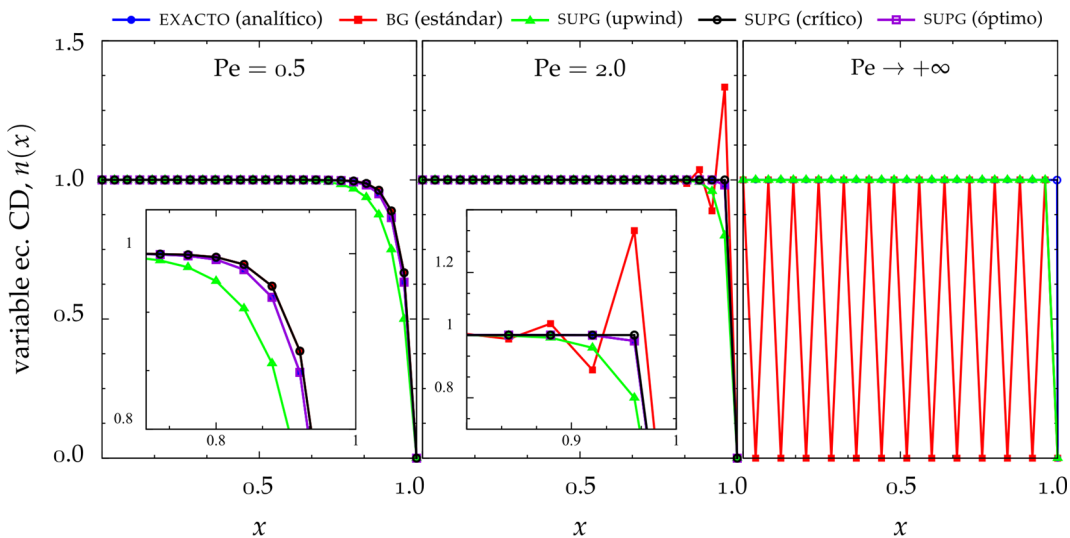


Fig. 3.3-2: Efecto del pesado *upwind* en problemas de convección dominante. Se muestran los resultados equivalentes al problema ilustrado en la Fig. 3.3-1: $un_x - \mathcal{D}n_{xx} = 0$, con $n(0) = 1$ y $n(1) = 0$, para diferentes Pe .

^f El concepto de molécula computacional se estableció, originalmente, en el contexto de FD, y alude a la discretización de los diferentes términos de la ecuación (convección, difusión, reacción, etc) por medio de una representación gráfica (tipo grafo) de los nodos implicados en la misma así como los correspondientes pesos asociados.

$$\alpha_{\text{crítico}} = 1 - \frac{1}{\text{Pe}}. \quad \langle 3.3.23 \rangle$$

La otra situación límite contemplada en la Fig. 3.3-2 es el caso $\text{Pe} \gg 1$:

$$\alpha_{\text{upwind}} = \lim_{\text{Pe} \rightarrow +\infty} \coth(\text{Pe}) - \frac{1}{\text{Pe}} = 1. \quad \langle 3.3.24 \rangle$$

Estrictamente hablando, la definición del factor de peso en $\langle 3.3.24 \rangle$ como *upwind* es un abuso del lenguaje, derivado del uso de esquemas de primer orden del tipo *upwind* en el contexto original de los esquemas con limitadores en FD (Van Leer^{11,12} y Boris-Book^{13,14}). En tales casos, la presencia de estos términos permitía preservar el carácter monótono (condición necesaria para la convergencia, Teorema de Godunov⁸ (1959)) de los esquemas cuando aquellos términos de mayor precisión (órdenes superiores a 1, en general) inducían inestabilidades. Por esta razón hemos adoptado esta filosofía en la notación, ya que de acuerdo con $\langle 3.3.17 \rangle$, el factor de peso definido en $\langle 3.3.24 \rangle$ conduce a un esquema *upwind* (**de primer orden**) para el término convectivo. Esto significa que la precisión del término convectivo se reduce de un segundo orden (bajo la configuración original, equivalente a un

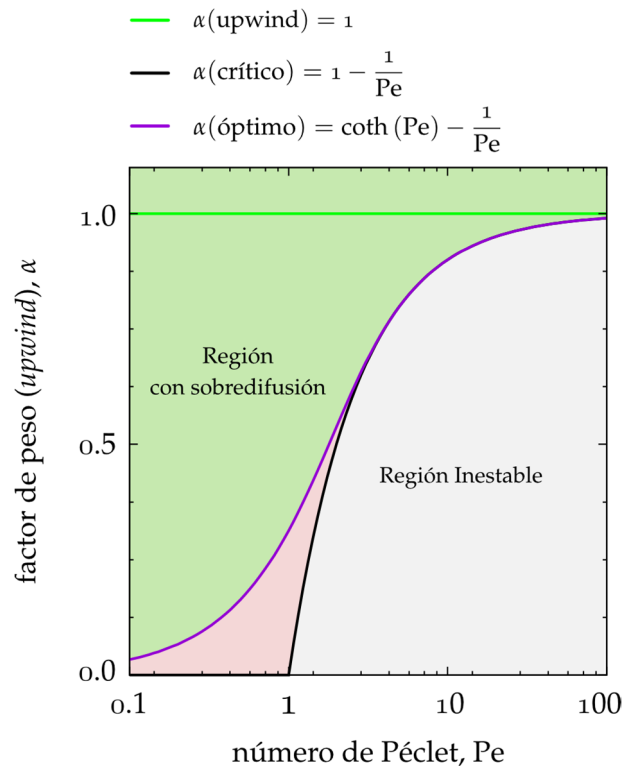


Fig. 3.3-3: Representación de los diferentes pesos para el término *upwind* (α), y su impacto sobre la estabilidad del esquema.

término del tipo *leapfrog* en FD) a un primer orden (bajo la configuración *upwind*). Como es sabido en FD, los problemas hiperbólicos bajo esquemas implícitos donde el término convectivo es de tipo *upwind* (y de primer orden) son **incondicionalmente estables**. De ahí que se recurra a este tipo de pesado en situaciones *localmente* difíciles de resolver mediante esquemas de órdenes superiores.

La representación de los diferentes α en términos del número de Péclet (Fig. 3.3-3) resume el efecto estabilizador de este tipo de funciones de forma. De este modo, la Fig. 3.3-3 muestra una zona inestable para valores de α inferiores a $\alpha_{\text{crítico}}$, mientras que toda la región por encima de $\alpha_{\text{óptimo}}$ conduce a un exceso de difusión que se traduce en una pérdida de precisión.

3.4 Discretización temporal

La representación estándar (ec. (3.2.14)) asume un planteamiento **prismático**⁹ o de discretización parcial sobre la variable tiempo, t . Esto significa que mientras las funciones de forma dan una solución aproximada en función de la discretización espacial del dominio, toda la información temporal queda contenida en los valores nodales. De este modo, (3.2.14) puede reescribirse mostrando la dependencia explícita con \mathbf{r} y t

$$w^h = \sum_{i=1}^{M-1} N_i(\mathbf{r}_i) \tilde{w}_i(t). \quad (3.4.1)$$

Como resultado ello, la ecuación semidiscreta (ec. (3.2.18)) se convierte en una ecuación diferencial ordinaria (ODE), siendo t la variable independiente.

Una de las alternativas posibles para la discretización temporal pasa por un tratamiento similar al seguido para la discretización espacial, donde se hace uso de un planteamiento en residuos ponderados. Con ello, al igual que ocurre en la parte espacial, la ecuación semidiscreta se cumple en promedio sobre cada paso de tiempo. Esta es la esencia de los métodos de **paso único** basados en *Backward Difference* (BDF) o α -*Generalized*^{9,22}.

En el caso de un esquema de primer orden:

$$\tilde{w}_i(\tau) = \tilde{w}_i^n + \tau \left(\frac{\tilde{w}_i^{n+1} - \tilde{w}_i^n}{\Delta t} \right), \quad (3.4.2)$$

donde $\tilde{w}_i^n = w_i(t^n)$ con $t^n = n\Delta t$, la expresión en residuos ponderados para la ecuación semidiscreta

$$\frac{\int_0^{\Delta t} [\mathbf{M}\dot{\tilde{w}} + \mathbf{K}\tilde{w} - \mathbf{F}] \omega(\tau) d\tau}{\int_0^{\Delta t} \omega(\tau) d\tau} = 0, \quad \tilde{w} = \begin{Bmatrix} \vdots \\ \tilde{w}_i \\ \vdots \end{Bmatrix} \quad (3.4.3)$$

puede transformarse en la expresión

$$\mathbf{M} \left(\frac{\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{w}}^n}{\Delta t} \right) + \mathbf{K} [\tilde{\mathbf{w}}^n + \vartheta (\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{w}}^n)] - \bar{\mathbf{F}} = 0, \quad \langle 3.4.4 \rangle$$

donde

$$\vartheta = \frac{1}{\Delta t} \frac{\int_0^{\Delta t} \tau \omega(\tau) d\tau}{\int_0^{\Delta t} \omega(\tau) d\tau} \quad \text{y} \quad \bar{\mathbf{F}} = \frac{\int_0^{\Delta t} \mathbf{F} \omega(\tau) d\tau}{\int_0^{\Delta t} \omega(\tau) d\tau}. \quad \langle 3.4.5 \rangle$$

Por tanto, $\langle 3.4.4 \rangle$ puede reorganizarse para obtener el sistema de ecuaciones que define los nuevos valores nodales

$$\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} = [\mathbf{M} + \Delta t \vartheta \mathbf{K}]^{-1} \cdot \{[\mathbf{M} - \mathbf{K}(1 - \vartheta)\Delta t] \tilde{\mathbf{w}}^n + \Delta t \bar{\mathbf{F}}\}. \quad \langle 3.4.6 \rangle$$

El algoritmo

En la práctica, la relación $\langle 3.4.6 \rangle$ no puede resolverse exactamente, por lo que se recurre a un proceso iterativo basado en el residuo **numérico** de la formulación en cuestión. De esta manera, además de las aproximaciones inducidas por la discretización espacial y temporal (que introducen un error vinculado a la calidad de sendas aproximaciones respecto del comportamiento espacial y temporal de la solución real del problema), debe considerarse que $\langle 3.4.6 \rangle$ solo se satisface de manera aproximada debido a la discretización numérica, es decir, el método de resolución numérico seguido en $\langle 3.4.6 \rangle$ añade una tercera dimensión a la discretización del problema y con ello un **error (numérico)** relacionado con el **condicionamiento del sistema**⁸ $\langle 3.4.6 \rangle$. En este sentido se define el **residuo** asociado a la formulación $\langle 3.4.4 \rangle$ de acuerdo con la relación que sigue:

$$\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{w}}^{n+1}) := \mathcal{J} \tilde{\mathbf{w}}^{n+1} - [\mathbf{M} - \mathbf{K}(1 - \vartheta)\Delta t] \tilde{\mathbf{w}}^n - \Delta t \bar{\mathbf{F}}, \quad \langle 3.4.7 \rangle$$

donde,

$$\mathcal{J} = \frac{\partial \mathcal{R}(\tilde{\mathbf{w}}^{n+1})}{\partial \tilde{\mathbf{w}}^{n+1}} = [\mathbf{M} + \Delta t \vartheta \mathbf{K}], \quad \langle 3.4.8 \rangle$$

⁸ En el ámbito del análisis numérico, el condicionamiento de un sistema de ecuaciones mide la “sensibilidad” (en términos de convergencia) del sistema frente a pequeñas variaciones en las variables a resolver. En sentido, asumido el error numérico, se entiende que las soluciones en cada paso de tiempo son del tipo: $\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} + \delta \tilde{\mathbf{w}}^{n+1}$, siendo $\delta \tilde{\mathbf{w}}^{n+1}$ el error numérico del sistema. Este tipo de errores así como la convergencia del método usado para resolver el sistema suele analizarse a partir de lo que se conoce como **número de condición**,

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|,$$

donde A representa la matriz de coeficientes asociada al sistema de ecuaciones, $A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$.

define la **matriz tangente** o **Jacobiana** del problema. Para resolver el sistema $\mathcal{R}(\tilde{\mathbf{w}}^{n+1}) = 0$ se sigue un algoritmo basado en el método iterativo de Newton-Raphson con un predictor lineal:

Paso 1. En primer lugar, se calcula una solución aproximada para el instante t^{n+1} a partir de un predictor lineal:

$${}_0\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} = \tilde{\mathbf{w}}^n + \Delta t \dot{\tilde{\mathbf{w}}}^n, \quad \langle 3.4.9 \rangle$$

donde el subíndice que precede a la base $\tilde{\mathbf{w}}$ indica el índice de la iteración. En cuanto a $\dot{\tilde{\mathbf{w}}}^n$, puede obtenerse de la ecuación semidiscreta dado que $\tilde{\mathbf{w}}^n$ satisface dicha ecuación,

$$\dot{\tilde{\mathbf{w}}}^n = \mathbf{M}^{-1} \cdot [-\mathbf{K}\tilde{\mathbf{w}}^n + \mathbf{F}]. \quad \langle 3.4.10 \rangle$$

La solución del sistema de ecuaciones $\langle 3.4.10 \rangle$ puede llevarse a cabo tanto con resolvedores directos como iterativos, dependiendo de la naturaleza del sistema en cuestión y de los grados de libertad del mismo.

Paso 2. A partir de $\langle 3.4.7 \rangle$ se obtiene el residuo correspondiente a la primera iteración, esto es,

$${}_0\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} \longrightarrow \mathcal{R}({}_0\tilde{\mathbf{w}}^{n+1}). \quad \langle 3.4.11 \rangle$$

Paso 3. Conocido el residuo asociado a la iteración, cuando no supere el criterio de convergencia se calcula el factor de amortiguamiento por medio de éste (ec. $\langle 3.4.8 \rangle$):

$$\Delta\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} = \mathcal{J}^{-1} \mathcal{R}({}_0\tilde{\mathbf{w}}^{n+1}) \quad \langle 3.4.12 \rangle$$

Paso 4. De acuerdo con $\langle 3.4.9 \rangle$ el vector de los nuevos valores nodales para $n + 1$ resulta

$${}_1\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} = {}_0\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} + {}_1\Delta\tilde{\mathbf{w}}^{n+1}. \quad \langle 3.4.13 \rangle$$

Paso 5. Finalmente se estudia el error sobre el residuo, esto es,

$$\|\mathcal{R}({}_1\tilde{\mathbf{w}}^{n+1})\| < \epsilon, \quad \langle 3.4.14 \rangle$$

a partir de cual se establece:

$$1 - \Theta(\|\mathcal{R}({}_1\tilde{\mathbf{w}}^{n+1})\| - \epsilon) = \begin{cases} 1 & \implies \tilde{\mathbf{w}}^{n+1} := {}_1\tilde{\mathbf{w}}^{n+1} \\ 0 & \implies \text{Paso 3} \end{cases} \quad \langle 3.4.15 \rangle$$

donde Θ representa una función escalón o función de Heaviside.

Paso 6. Si después de un máximo de iteraciones no se alcanza solución convergente, se reduce el paso de tiempo, Δt , a una fracción de éste de acuerdo con algún criterio (se utiliza por defecto una reducción de un orden de magnitud).

3.5 Precisión y Estabilidad

Para entender las dificultades derivadas de las aproximaciones implícitas en el esquema numérico conviene tener presente que, numéricamente, solo es posible aspirar a resolver una **ecuación diferencial equivalente**⁸ (EDE). Es por esto que no existe ningún misterio en el hecho de que el comportamiento del sistema, en ocasiones, “*se aleje de lo esperado*”. Este hecho manifiesta la importancia de cuantificar y predecir el comportamiento de los errores numéricos asociados a un esquema. Para ello se utiliza un análisis espectral del error o **método de von Neumann**^{16,17}. La esencia de este método reside en la linealidad del esquema numérico. En este sentido, la solución calculada a partir de (3.4.6) puede escribirse como solución aproximada exacta más el **error de truncado**^h (incluye errores numéricos), esto es,

$$\tilde{w}_i^n = \widehat{w}_i^n + \hat{\varepsilon}_i^n, \quad \langle 3.5.1 \rangle$$

donde $\hat{\varepsilon}_i^n$ indica el error asociado al punto de la malla i , siendo n el índice de tiempo; y \widehat{w}_i^n representa la solución exacta de la ecuación diferencial original bajo las aproximaciones implícitas en la discretización espacial y temporal. De este modo, conforme a la linealidad del esquemaⁱ se tiene:

$$\mathcal{N}(\tilde{w}_i^n) = \mathcal{N}(\widehat{w}_i^n) + \mathcal{N}(\hat{\varepsilon}_i^n) = \mathcal{N}(\hat{\varepsilon}_i^n) = 0. \quad \langle 3.5.2 \rangle$$

Por tanto, en estas condiciones, estudiar el comportamiento del error equivale a estudiar el comportamiento de la propia solución numérica. Así, para una función arbitraria definida sobre la malla cuya solución es \tilde{w}_i^n , la descomposición correspondiente en una serie finita de Fourier viene dada por la expresión:

$$\tilde{w}_i^n = \sum_{l=-N}^N V_l^n e^{jk_l x_i} = \sum_{l=-N}^N V_l^n e^{jk_l i h} = \sum_{l=-N}^N V_l^n e^{j i \phi_l}, \quad \langle 3.5.3 \rangle$$

^h No debe confundirse este error de truncado con el error asociado a la aritmética del ordenador. Este error está aquí referido a todos los términos truncados en la aproximación espacial y temporal. Así por ejemplo, de acuerdo con la discretización espacial hemos visto que los términos convectivos adoptan una estructura equivalente (en FD) a un esquema centrado o bien *upwind* de primer orden, según sea el valor del factor de peso α . Esto significa que en un desarrollo en serie de Taylor, en torno al nodo en cuestión, estaríamos truncando a partir del tercer orden, en el mejor caso. Por este motivo, la ecuación diferencial (discretizada) que resolvemos no sería la original sino una relación equivalente (EDE) que contempla el problema original y los términos truncados.

ⁱ Se utiliza la letra caligráfica \mathcal{N} para referirnos al operador (numérico) asociado a la ecuación diferencial del problema en cuestión. Así, tomando como ejemplo el problema de convección-difusión (3.3.1), $\mathcal{N}(\tilde{w})$ equivale a la discretización espacial correspondiente, dada en (3.3.5).

donde V_l^n representa amplitud del armónico l -ésimo y $j = \sqrt{-1}$. En (3.5.3) se han utilizado las relaciones:

$$k_l = k_0 l = l \frac{\pi}{L} = l \frac{\pi}{Nh}, \quad k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_{\text{máx}}} = \frac{\pi}{L}, \quad \phi_l \equiv k_l h. \quad (3.5.4)$$

La condición de estabilidad de von Neumann establece que un esquema será estable en tanto que la amplitud de un armónico arbitrario no crezca en el tiempo. Para ello se define el factor de amplificación, G , como sigue:

$$G = \frac{V^{n+1}}{V^n}. \quad (3.5.5)$$

Con esta magnitud, la condición de estabilidad puede expresarse como:

$$|G| \leq 1, \quad \forall \phi_l \text{ con } l = -N, \dots, N. \quad (3.5.6)$$

En términos del esquema (3.4.6), esto significa aplicar la descomposición (3.5.3) sobre el soporte correspondiente $(i-1, i, i+1)^j$:

$$\begin{bmatrix} \frac{h}{6} - \left(\frac{u}{2} + \frac{D}{h}\right) \vartheta \Delta t \\ \frac{2}{3}h + \frac{2D}{h} \vartheta \Delta t \\ \frac{h}{6} + \left(\frac{u}{2} - \frac{D}{h}\right) \vartheta \Delta t \end{bmatrix}^T \cdot \begin{Bmatrix} \widetilde{w}_{i+1}^{n+1} \\ \widetilde{w}_i^{n+1} \\ \widetilde{w}_{i-1}^{n+1} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{h}{6} + \left(\frac{u}{2} + \frac{D}{h}\right) (1 - \vartheta) \Delta t \\ \frac{2}{3}h - \frac{2D}{h} (1 - \vartheta) \Delta t \\ \frac{h}{6} - \left(\frac{u}{2} - \frac{D}{h}\right) (1 - \vartheta) \Delta t \end{bmatrix}^T \cdot \begin{Bmatrix} \widetilde{w}_{i+1}^{n+1} \\ \widetilde{w}_i^{n+1} \\ \widetilde{w}_{i-1}^{n+1} \end{Bmatrix}$$

Resulta, entonces, el factor de amplificación:

$$G_\vartheta = \frac{1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left(\frac{\phi}{2}\right) - (1 - \vartheta) \left[j\sigma \sin \phi + 4d \sin^2 \left(\frac{\phi}{2}\right) \right]}{1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left(\frac{\phi}{2}\right) + \vartheta \left[j\sigma \sin \phi + 4d \sin^2 \left(\frac{\phi}{2}\right) \right]} \quad (3.5.7)$$

donde,

$$\sigma = \frac{u\Delta t}{h}, \text{ y } d = \frac{D\Delta t}{h^2}, \quad (3.5.8)$$

representan el **número de Courant** y **de difusión**, respectivamente.

Finalmente, a partir del factor de amplificación pueden definirse dos magnitudes que permiten cuantificar el error asociado al esquema:

^j Seguimos aquí la notación adoptada por Zienkiewicz⁹, donde se distingue entre matrices ($[\]$) y vectores o matrices de una columna ($\{ \}$).

$$\varepsilon_D = \frac{|G|}{|G_{\text{ex}}|} \quad , \quad \varepsilon_\Phi = \frac{\text{Arg}(G)}{\text{Arg}(G_{\text{ex}})} \quad \langle 3.5.9 \rangle$$

que representan el **error de difusión** y **de dispersión**, respectivamente. El factor G_{ex} alude al factor de amplificación exacto del problema en cuestión. El error de difusión permite cuantificar la atenuación o amplificación del esquema en función de la frecuencia, mientras que el error de dispersión muestra en qué medida la onda numérica se adelanta o retrasa respecto de la solución exacta.

En la Fig. 3.5-1 se ha representado el error de difusión para $\langle 3.5.7 \rangle$ en problemas de convección dominante, mostrándose el efecto de la ponderación temporal en esquemas de primer orden. Como puede verse, para $\vartheta = 1/2$ el esquema llega a hacerse de segundo orden con un error de difusión igual a 1. Sin embargo, el hándicap de esta precisión se traduce en la imposibilidad de amortiguar cualquier error en la solución, por lo que los errores pueden ganar importancia con la evolución de la solución.

Por otra parte la Fig. 3.5-2 muestra que, en el caso $\vartheta = 1/2$, el error en la fase permanece en todo momento por debajo de 1, por lo que la onda numérica tiende a retrasarse respecto de la solución exacta. En particular, en la región de altas frecuencias, la fase se pierde completamente, por lo que tiene sentido usar mecanismo de *upwind* mostrado en §3.3 (ec. $\langle 3.3.17 \rangle$). Es decir, el retraso generado por el esquema es compatible con una redistribución de los pesos en la discretización espacial. De tal modo que

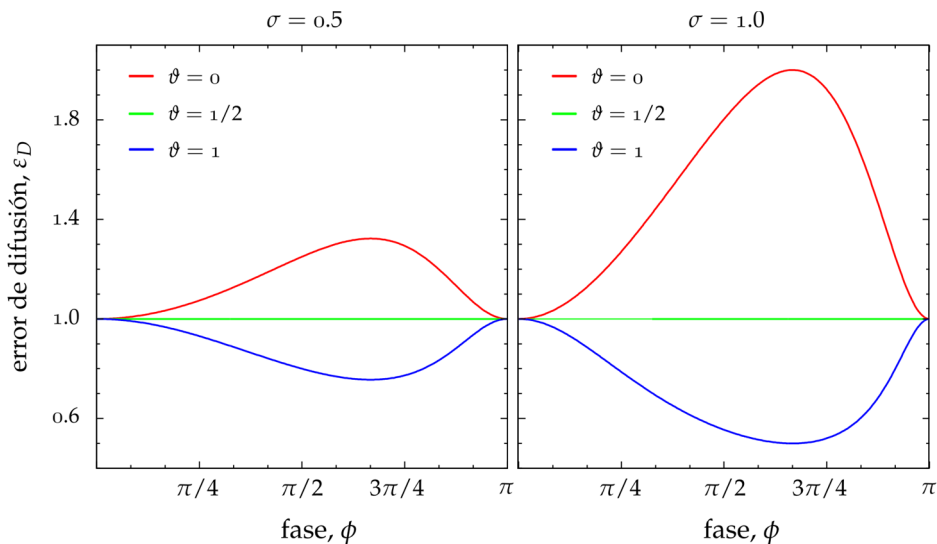


Fig. 3.5-1: Error de difusión para esquemas de primer orden bajo formulación estándar en problemas de convección dominante (ec. $\langle 3.5.9 \rangle$).

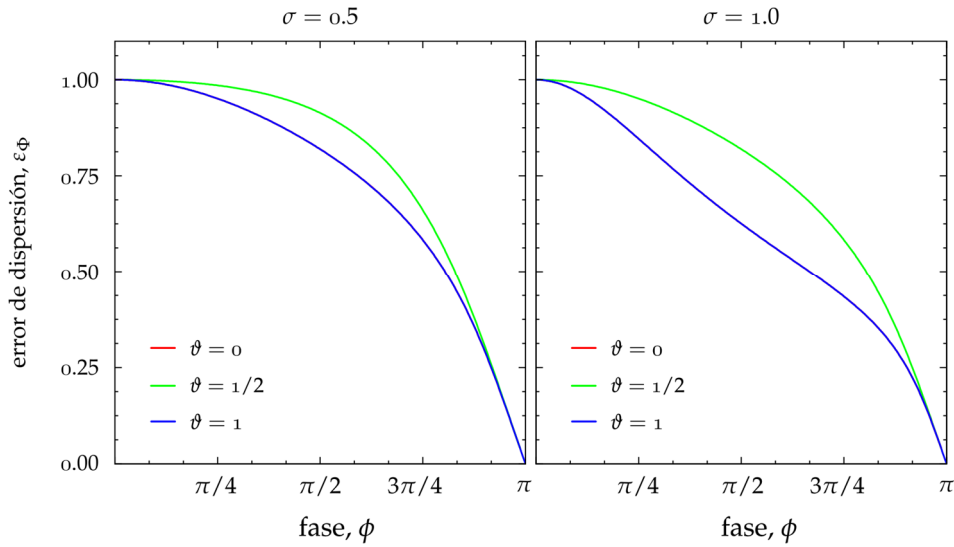


Fig. 3.5-2: Error de dispersión para esquemas de primer orden bajo formulación estándar en problemas de convección dominante (ec.(3.5.9)).

aquellos nodos situados *aguas arriba* tendrán mayor importancia que los situados *aguas abajo*, rompiendo así la simetría de la formulación estándar.

No obstante, una situación del tipo *upwind* como la presentada anteriormente introduce un término de difusión que conduce a una mayor atenuación sobre la solución. El efecto de este término de estabilización sobre

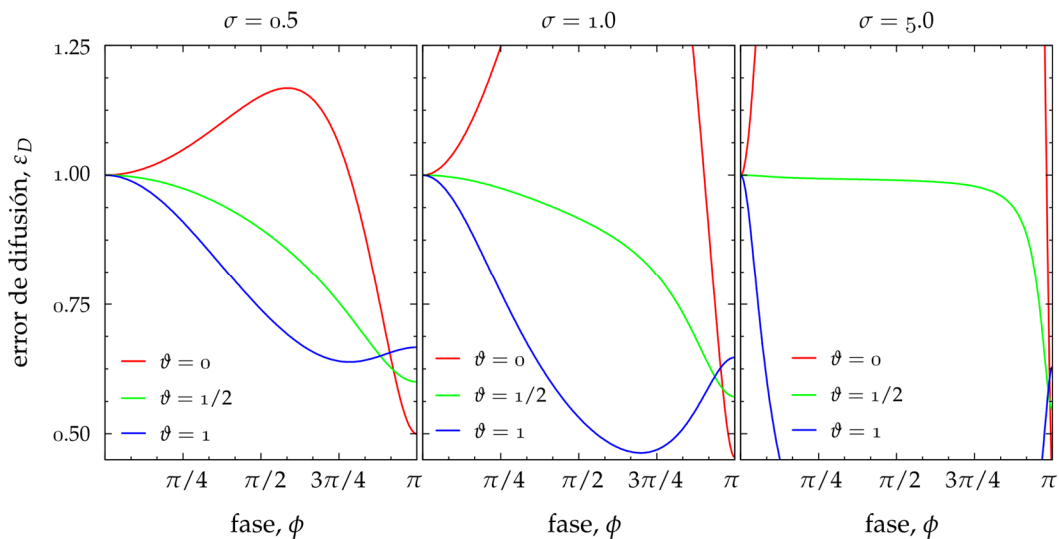


Fig. 3.5-3: Error de difusión en esquemas de primer orden bajo formulación *upwind* en problema de convección dominante (ec.(3.5.9)). Se ha utilizado el factor α correspondiente a la situación crítica (ec. (3.3.23)).

el error de difusión puede verse en la Fig. 3.5-3, donde se incorpora la situación para altos números de Courant, $\sigma = 5$, con la intención de mostrar como mejora el comportamiento del sistema conforme σ aumenta. En realidad, no es ningún misterio, ya que con u (velocidad) y Δt (paso de tiempo) fijos, el aumento de σ equivale a una disminución de la magnitud del tamaño del elemento (h). Por tanto, este tipo de estabilización sólo tiene sentido cuando el tamaño de la malla sea suficientemente pequeño.

A diferencia de lo que ocurre con el error de difusión, el error de dispersión no mejora precisamente con el aumento de σ . Esto hace que el uso de este tipo términos de estabilización deba *optimizarse* (minimizando el impacto sobre la fase) siguiendo una estrategia similar a la usada en los esquemas con limitadores (Van Leer^{11,12} y Boris-Book^{13,14}), donde se establece un balance entre un esquema de precisión elevada (formulación estándar con $\vartheta = 1/2$) y otro de menor precisión (formulación *upwind*). Aun así, la Fig. 3.5-2 muestra un error en la fase significativo en el caso de usar como esquema de alta precisión $\vartheta = 1/2$.

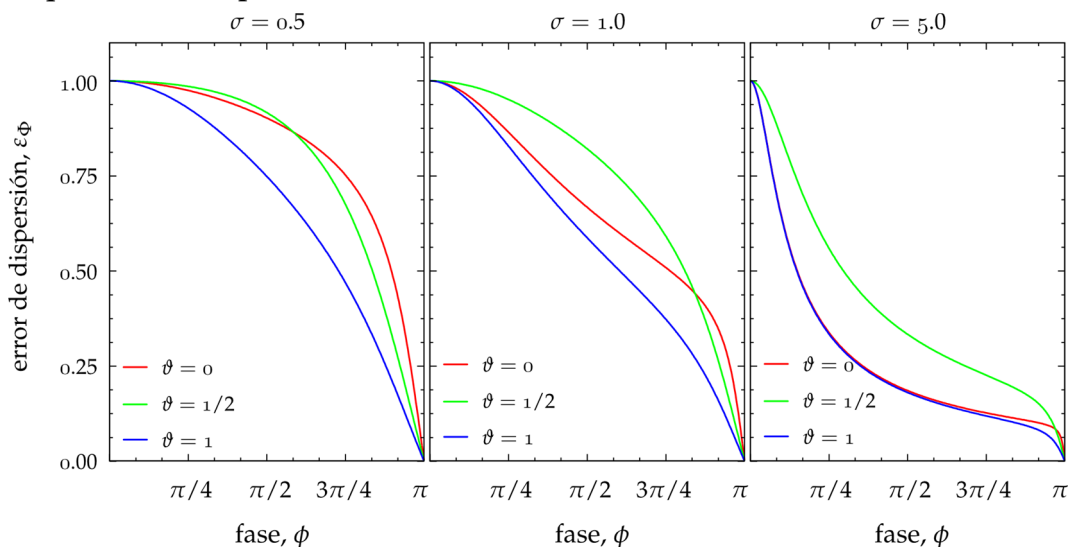


Fig. 3.5-4: Error de dispersión en esquemas de primer orden bajo formulación *upwind* en problema de convección dominante (ec. (3.5.9)). Se ha utilizado el factor α correspondiente a la situación crítica (ec. (3.3.23)).

3.6 Un test numérico²³⁻²⁵

Con el objetivo de testear la calidad de un esquema numérico de primer orden con $\vartheta = 1/2$, sobre el que actúa un término *upwind* en presencia de fuertes gradientes o discontinuidades, se comparan los resultados con los obtenidos por medio de FCT en FD. El hecho de usar como referencia los

cálculos en FCT se deriva de la precisión en la fase de este tipo de esquemas ($\varepsilon_{\Phi} \approx 1$). Así, con este propósito, se analiza el transitorio de una descarga corona bajo una configuración punta-plano (R. Morrow¹⁵). Sin entrar en el detalle de la formulación del problema en cuestión (para una discusión detallada véase §4.2), la parte numérica muestra dos aspectos fundamentales que permiten analizar la calidad del esquema en relación con los errores de difusión y dispersión:

1. En primer lugar, la presencia de diferentes especies (electrones e iones) con diferentes movilidades conduce a una secuencia de escalas de tiempo en la evolución de transitorio. Este hecho acentúa los errores en la fase y, por tanto, sirve como indicador del impacto del término *upwind* sobre la fase numérica^a. Conviene tener presente que los esquemas FCT prácticamente no generan error en la fase (Boris y Book¹³).
2. Otro aspecto importante del este problema es el hecho de que a lo largo del transitorio, la distorsión del campo eléctrico conduce a la formación de **ondas de choque** en las diferentes especies. En este sentido, no hay que olvidar que los esquemas FCT representan una configuración con limitador de pendiente, por lo que pertenecen al grueso de esquemas de alta resolución para situaciones difíciles, en

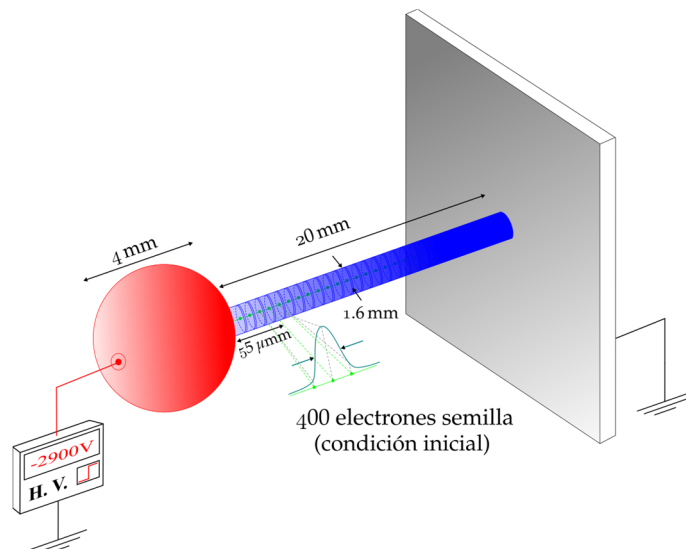


Fig. 3.6-1: Representación esquemática de la descarga corona en un modelo 1.5D (R. Morrow¹⁵).

^a En realidad el término *upwind* no es el único responsable del desfase, tal y como se muestra en la Fig. 3.5-2. Sin embargo, la presencia de este término produce un error de dispersión mucho más significativo que el asociado al esquema de $\theta = 1/2$ (véase Fig. 3.5-4). Por este motivo se asocia todo el error en la fase al término *upwind*.

términos numéricos, como ondas de choque o discontinuidades. Luego, la presencia de este tipo de gradientes junto con las discontinuidades introducidas por los términos de reacción sirven para medir la calidad del esquema y su estabilidad a altas frecuencias. La formulación del problema puede resumirse en un conjunto de ecuaciones de convección-difusión-reacción –CDR– (para las diferentes especies) acopladas con la ecuación de Poisson:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[-\mathcal{D}_e \frac{\partial n_e}{\partial x} + n_e v_e \right] &= (\alpha - \eta) |v_e| n_e - \beta n_e n_p, \\ \frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [n_p v_p] &= \alpha |v_e| n_e - \beta n_p (n_e + n_n), \\ \frac{\partial n_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [n_n v_n] &= \eta |v_e| n_e - \beta n_n n_p, \\ \nabla^2 \phi &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \end{aligned} \right\} \quad \langle 3.6.1 \rangle$$

donde n representa la densidad numérica; v la componente de arrastre de la velocidad debido al campo eléctrico; ϕ el potencial eléctrico; α, η, β y \mathcal{D} representan los coeficientes de ionización, captura, recombinación y difusión, respectivamente. El problema de transporte (ecuaciones de continuidad de las especies) se resuelve a lo largo del eje axial (Fig. 3.6-1). Posteriormente, aprovechando el carácter filamentario de la descarga, el valor de la densidad de carga a lo largo de cada uno de los puntos del eje se extiende uniformemente sobre los correspondientes discos que definen el canal de la descarga. Con ello, el cálculo del potencial se hace en 2D.

Las condiciones de contorno para la densidad de especies y el potencial eléctrico vienen dadas por las expresiones:

$$\begin{aligned} (x = 0) : & \begin{cases} n_e(t) v_e = \gamma_i v_p n_p + \Gamma_e^f, \\ n_n(t) = 0, \\ \phi = -2900 \text{ V}, \end{cases} \\ (x = d) : & \begin{cases} n_e(t) = 0, \\ n_p(t) = 0, \\ \phi = 0, \end{cases} \end{aligned} \quad \langle 3.6.2 \rangle$$

donde γ_i representa el coeficiente de emisión secundaria por impacto iónico y Γ_e^f el flujo de electrones inyectados desde el cátodo por efecto de los fotones producidos en el volumen de la descarga:

$$\Gamma_e^f = \frac{\gamma_p}{\tau} \int_0^t e^{-\frac{t-t'}{\tau}} \int_0^d n_e(x, t') |v_e(x, t')| \alpha^*(x, t') \Omega(x) e^{-\mu x} dx, \quad \langle 3.6.3 \rangle$$

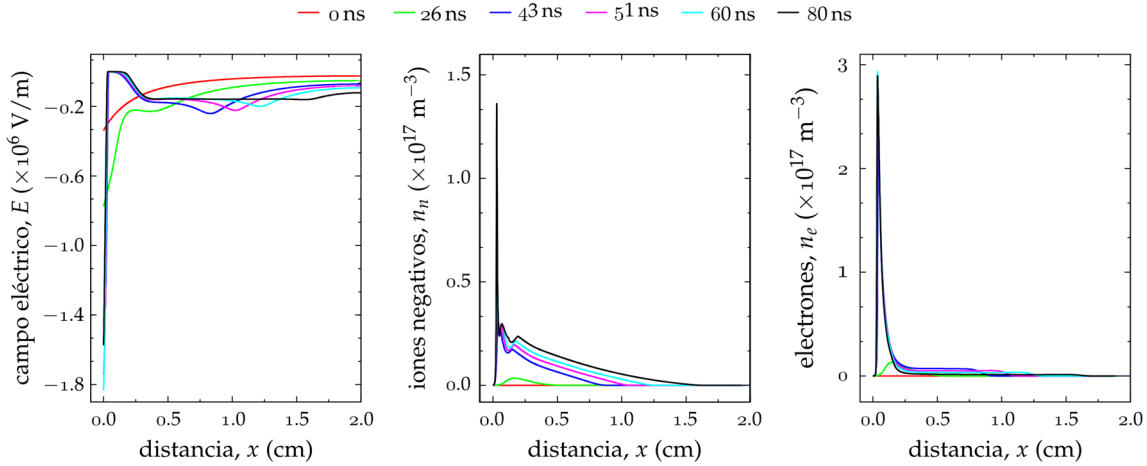


Fig. 3.6-2: Evolución del campo eléctrico y especies negativas en un esquema CN ($\vartheta = 1/2$) en FEM.

siendo γ_p un factor de eficiencia, τ la vida media de las especies excitadas, α^* el coeficiente de excitación, μ el coeficiente de absorción del medio y $\Omega(x)$ el ángulo sólido definido por el disco de carga situado a una distancia x desde punto del cátodo situado en el eje de simetría.

Con relación al primer punto del test (error de dispersión), en la Fig. 3.6-2 se muestra la distorsión del campo eléctrico debida a la carga producida en el desarrollo de la descarga. Las diferencias entre las movilidades iónicas y electrónica hacen que el efecto del desfase numérico se acentúe en la densidad de carga. De manera que, aun cuando los perfiles de densidad de las especies

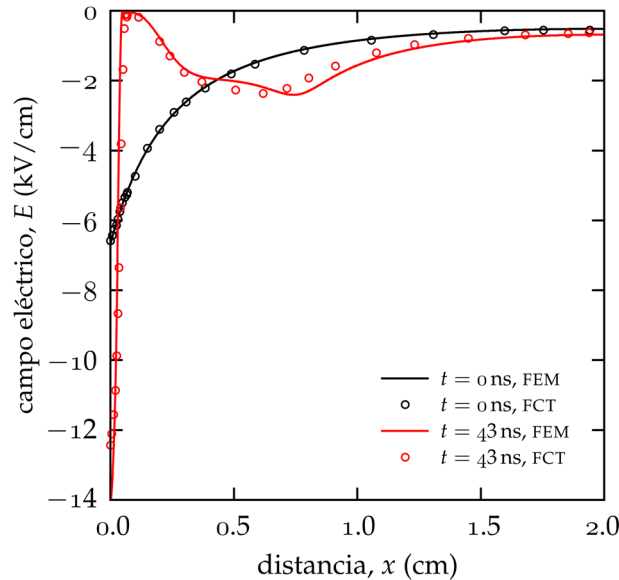


Fig. 3.6-3: Evolución del campo eléctrico bajo un esquema en FD basado en FCT y los obtenidos en FEM con un esquema CN ($\vartheta = 1/2$)+SUPG.

quedan bien resueltos, pueden surgir dificultades numéricas motivadas por la separación de carga. Por tanto, la evolución del campo eléctrico es un excelente indicador de las diferentes escalas de tiempo y sus efectos. En este sentido, puede apreciarse (Fig. 3.6-3) un ligero desfase respecto de los resultados obtenidos por medio de FCT en FD. Esta diferencia de fase está en consonancia con la calidad de los esquemas FCT en lo que respecta al error de dispersión^b, y los resultados obtenidos para el esquema CN ($\vartheta = 1/2$) bajo elementos finitos (Fig. 3.5-4).

En cuanto al segundo punto del test (errores de difusión), los resultados mostrados en la Fig. 3.6-4 ponen de manifiesto la importancia de controlar este tipo de errores. Como puede verse en la Fig. 3.6-2, la distorsión del campo eléctrico induce la formación de frentes de choque en las diferentes especies, y con ello el comportamiento del esquema a altas frecuencias es crucial para la estabilidad del problema numérico. En principio, en dicha figura (Fig. 3.6-2) solo se muestran las especies negativas porque el comportamiento “asimétrico” del esquema, respecto de los términos de reacción (generación o destrucción), hace que la estabilidad del problema numérico esté determinada por la evolución de los términos de captura

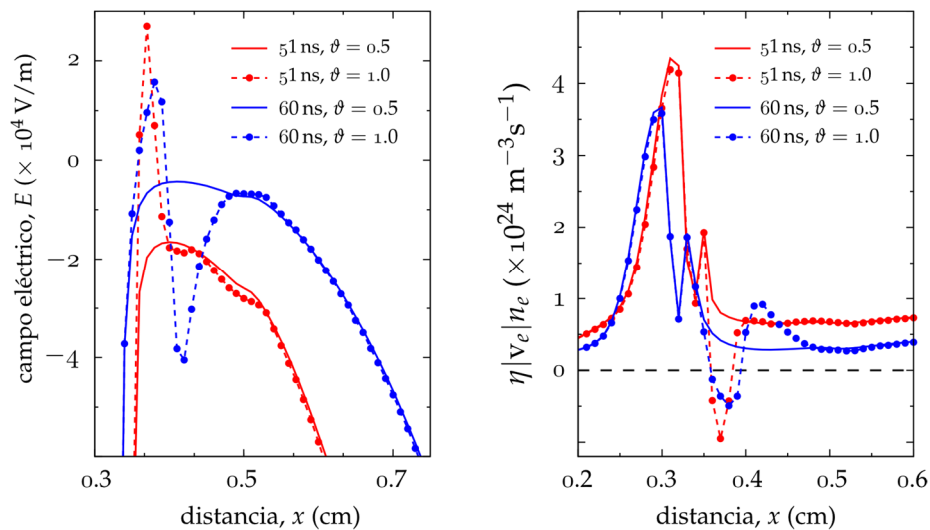


Fig. 3.6-4: Comparación de la evolución del campo eléctrico y el término de reacción asociado a la captura electrónica ($\eta_2 + \eta_3$). En la gráfica de la derecha, el pico que aparece en torno a 0.35 mm, tanto para $\vartheta = 1/2$ como para $\vartheta = 1$, no es un efecto numérico y se debe a la estructura de los coeficientes η_2 y η_3 . Sí lo son, en cambio, las posteriores oscilaciones en el caso de $\vartheta = 1$.

^b Los esquemas FCT no genera un error de dispersión en problemas de convección pura con velocidad constante.

electrónica (esto es, términos de reacción de destrucción). Antes de explicar por qué esto es así, conviene resaltar los resultados de la Fig. 3.6-4, donde se muestra el papel de la ponderación en el tiempo en la estabilidad del esquema. Aunque los resultados mostrados en las figuras Fig. 3.5-1 y Fig. 3.5-3 parecen contradecir los presentados en la Fig. 3.6-4 (es decir, $\vartheta = 1$ exhibía una mayor atenuación, tanto en la Fig. 3.5-1 como en la Fig. 3.5-3, y con ello se esperaba una mayor estabilidad), en realidad no ocurre así, ya que estas figuras (Fig. 3.5-1 y Fig. 3.5-3) responden al caso de un problema tipo convección-difusión (CD). De este modo, al introducir los términos de reacción, el factor de amplificación resulta (CDR):

$$G_{\vartheta} = \frac{[1 + (1 - \vartheta)Da \sigma] \delta(\phi) - (1 - \vartheta)z(\phi)}{[1 + \vartheta Da \sigma] \delta(\phi) + \vartheta z(\phi)}, \quad \langle 3.6.4 \rangle$$

donde,

$$\begin{aligned} \delta(\phi) &= 1 - \frac{2}{3} \sin^2 \left(\frac{\phi}{2} \right), \\ z(\phi) &= j\sigma \sin \phi + 4d \sin^2 \left(\frac{\phi}{2} \right), \\ Da &= \frac{\nu h}{v}, \end{aligned} \quad \langle 3.6.5 \rangle$$

siendo Da el número de Damköhler, ν es la frecuencia de colisión asociada al término de reacción en cuestión, v la velocidad relativa entre especies y h el tamaño de la malla. Las funciones $\delta(\phi)$ y $z(\phi)$ están en correspondencia

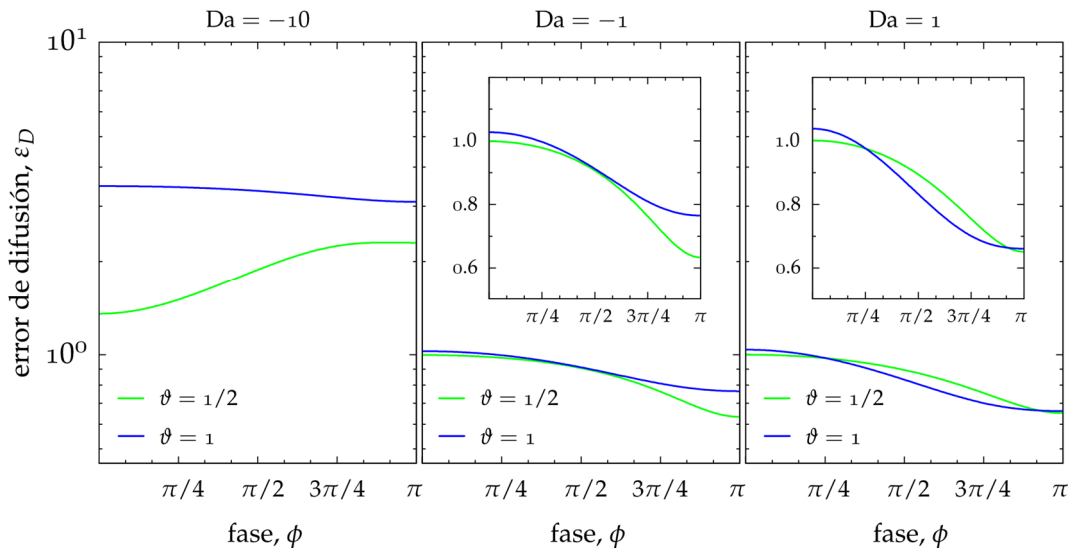


Fig. 3.6-5: Error de difusión en esquema de primer orden, CN+SUPG, para ecuaciones CDR.

con la relación (3.5.7), y con ello d representa el número de difusión, σ el número de Courant y $j = \sqrt{-1}$.

En estas condiciones, en la Fig. 3.6-5 se muestran tres situaciones específicas para el número de Damköhler que definen los casos límites para la estabilidad del problema, dado un valor de h . Las gráficas para $Da = \pm 1$ exhiben, en general, una atenuación respecto del efecto real de ionización o captura. No obstante, es significativa la ligera amplificación mostrada en la región de bajas frecuencias por el esquema implícito ($\vartheta = 1$). En cualquier caso, es de esperar que para $|Da| < 1$ ambos esquemas muestren un buen comportamiento. Por otra parte, la gráfica para $Da = -10$ pone de manifiesto la inestabilidad de los términos de captura debido al efecto de amplificación mostrado tanto para $\vartheta = 1/2$ como para $\vartheta = 1$. Además esta figura también revela que los esquemas implícitos ($\vartheta = 1$) son más sensibles a estas inestabilidades casi con independencia de la fase en cuestión. En cambio, los esquemas CN ($\vartheta = 1/2$) salvan *relativamente bien* este tipo de situaciones con Da elevados, siempre y cuando se mantenga el esquema en la zona de bajas frecuencias. Esta conclusión permite explicar el comportamiento mostrado en la Fig. 3.6-4, donde la inestabilidad de los términos de captura distorsiona significativamente la solución. Falta por demostrar, entonces, que las situaciones representadas en la Fig. 3.6-5 son realmente los casos determinantes en este problema. Para ello, basta reconsiderar la definición del número de Damköhler en los siguientes términos:

$$Da = \frac{\nu h}{v} = \sigma(v) N_{gas} h, \quad (3.6.6)$$

donde $\sigma(v)$ representa la sección eficaz del proceso en cuestión (ionización o captura) y N_{gas} la densidad del gas (O_2). En las condiciones del problema, a una presión de 50 Torr, se tiene ($N_{gas} \sim 10^{24} \text{ m}^{-3}$):

$$\begin{aligned} \text{máx}(\sigma)|_{\alpha} &< 10^{-19} \text{ m}^2 \xrightarrow{h=10^{-5} \text{ m}} Da < 1, \\ \text{máx}(\sigma)|_{\eta} &\sim 10^{-18} \text{ m}^2 \xrightarrow{h=10^{-5} \text{ m}} Da \sim -10. \end{aligned} \quad (3.6.7)$$

Por tanto, con un tamaño de malla $h = 10^{-5} \text{ m}$, el término de ionización se mantiene en el límite de $Da = 1$, por lo que se resuelve perfectamente. En cambio, los términos de captura se hacen inestables ($Da = -10$) al tomar su valor máximo. Precisamente esta situación tiene lugar cuando el coeficiente de captura η_3 predomina sobre η_2 . La región de colapso del campo eléctrico (donde $E \approx 0$) que surge tras la distorsión del mismo se corresponde con dicha zona. Por último, como puede verse en la Fig. 3.6-6, la transición de η_2 a η_3 genera un pico de alta frecuencia en la zona comprendida entre el

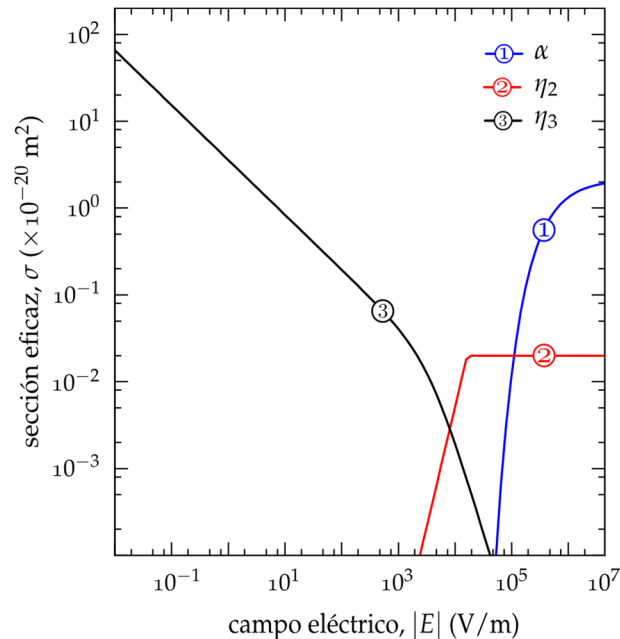


Fig. 3.6-6: Representación de las secciones eficaces para el problema de Morrow¹⁵: ionización (α); captura electrónica —2 cuerpos— (η_2); captura electrónica —3 cuerpos— (η_3).

gradiente máximo de E y la región de colapso del campo eléctrico. Esto explica que la presencia del pico en la Fig. 3.6-4 en torno a 0.35 mm no sea un efecto numérico y sí las oscilaciones posteriores, tal y como se indicaba en dicha figura (Fig. 3.6-4).

3.7 Algunas conclusiones finales

A modo de resumen, los aspectos fundamentales abordados en este capítulo giran en torno a las dificultades numéricas analizadas en las descargas eléctricas, como es el caso del problema propuesto en la sección del test numérico (§3.6). Se organizan estas características en los siguientes puntos:

1. En problemas de convección dominante, la formulación estándar en el FEM introduce inestabilidades cuando $Pe > 1$. La formulación SUPG permite salvar estas situaciones rompiendo con la simetría espacial de las funciones de forma (Fig. 3.3-2).
2. En la formulación SUPG, el peso asociado al término estabilizador (α) es crítico en la estabilidad del problema (Fig. 3.3-2). La relación (3.3.20) define el valor óptimo para dicho peso en caso de convección dominante (Fig. 3.3-3).
3. La contrapartida a la estabilidad asociada a la formulación SUPG viene dada por el hecho de reducir la precisión, ya que, en última instancia se transforma

la parte convectiva de una diferencia centrada a un término *backward* de primer orden. Por este motivo, en problemas transitorios, la difusión artificial introducida por el término *upwind* puede ser excesiva.

4. Para evitar el exceso de difusión artificial debido al término *upwind*, se plantea como alternativa, en el caso problemas transitorios, un esquema híbrido entre un CN ($\vartheta = 1/2$) y SUPG. Este último, actuando a modo de limitador, permite mantener la calidad del error de difusión del primero filtrando la región de altas frecuencias (Fig. 3.5-3).
5. En situaciones de reacción dominante, la ponderación temporal juega un papel crucial en lo que respecta a la sensibilidad del esquema frente a las discontinuidades introducidas por los términos de reacción (Fig. 3.6-5).
6. En general, la sensibilidad del esquema CN+SUPG no es simétrica en lo que respecta a términos de reacción fuentes o sumideros. Esta diferencia se acentúa con el aumento de Da (Fig. 3.6-5).

Bibliografia

1. Strutt, J. W. On the theory of resonance. *Philos. Trans. R. Soc. Lond.* **161**, 77–118 (1871).
2. Ritz, W. Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik. (1909).
3. Galerkin, B. G. Series solution of some problems of elastic equilibrium of rods and plates. *Vestn Inzh Tekh* **19**, 897–908 (1915).
4. Courant, R. & others. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibrations. *Bull Amer Math Soc* **49**, 1–23 (1943).
5. Turner, M. J. Stiffness and deflection analysis of complex structures. *J. Aeronaut. Sci. Inst. Aeronaut. Sci.* **23**, (1956).
6. Clough, R. W. The finite element method in plane stress analysis. (1960).
7. Brooks, A. N. & Hughes, T. J. R. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **32**, 199–259 (1982).
8. Donea, J. & Huerta, A. *Finite Element Methods for Flow Problems*. (Wiley, 2003).
9. Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L. & Zhu, J. Z. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals, Sixth Edition*. (Butterworth-Heinemann, 2005).
10. Zienkiewicz, O. C., Taylor, R. L. & Nithiarasu, P. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics, Sixth Edition*. (Butterworth-Heinemann, 2005).
11. Van Leer, B. Towards the ultimate conservative difference scheme I. The quest of monotonicity. in *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics* 163–168 (Springer, 1973).
12. Van Leer, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *J. Comput. Phys.* **14**, 361–370 (1974).
13. Boris, J. P. & Book, D. L. Flux-corrected transport. I. SHASTA, A fluid transport algorithm that works. *J. Comput. Phys.* **11**, 38–69 (1973).
14. Boris, J. P. & Book, D. L. Solution of continuity equations by the method of flux-corrected transport. *Control. Fusion* **1**, 85–129 (1976).
15. Morrow, R. Theory of negative corona in oxygen. *Phys. Rev. A* **32**, 1799–1809 (1985).
16. Crank, J., Nicolson, P. & Hartree, D. R. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.* **43**, 50 (1947).
17. Charney, J. G., Fjörtoft, R. & Neumann, J. Numerical Integration of the Barotropic Vorticity Equation. *Tellus* **2**, 237–254 (1950).

18. Reddy, J. N. *Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering*. (McGraw Hill Higher Education, 1986).
19. Brenner, S. C. & Scott, R. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. (Springer Science & Business Media, 2008).
20. Godunov, S. K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Mat. Sb.* **89**, 271–306 (1959).
21. Godunov, S. K. & Ryabenkii, V. S. *Theory of Difference Schemes*. (North-Holland Publ., Amsterdam, 1964).
22. Chung, J. & Hulbert, G. M. A Time Integration Algorithm for Structural Dynamics With Improved Numerical Dissipation: The Generalized- α Method. *J. Appl. Mech.* **60**, 371–375 (1993).
23. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Multi-species simulation of Trichel pulses in oxygen. *XXI Europhys. Conf. At. Mol. Phys. Ioniz. Gases* (2012).
24. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Numerical Modelling of Electrical Discharges. *J. Phys. Conf. Ser.* **490**, 012209 (2014).
25. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Multi-species simulation of Trichel pulses in oxygen. *J. Phys. Appl. Phys.* **47**, 415203 (2014).

Pulsos *de*
Trichel en **O₂**

Pulsos de Trichel en O₂

Capítulo

4

—“*And you do Addition?*” the White Queen asked.
“*What’s one and one and one and one and one and one
and one and one and one and one?*”

—“*I don’t know*”, said Alice. “*I lost count*”.

—“*She can’t do Addition*”, the Red Queen interrupted.

LEWIS CARROLL, *Through the Looking Glass*, 1871.

Contenido

4.1	Introducción	90
4.2	Formulación del problema	93
	Construcción de un modelo químico consistente—93	
	Descripción multifluida: una cuestión de escalas—100	
	Ecuaciones fluidas. Aproximaciones—102	
	Efectos de superficie. Interacción descarga-electrodo—104	
4.3	Descripción del modelo	106
	Sistema de ecuaciones de continuidad—108	
	Condiciones de contorno—110	
	Condiciones iniciales—112	
4.4	Aproximación numérica	112
4.5	Evolución de los pulsos de Trichel	114
	El primer pulso de Trichel—114	
	Pulsos de Trichel regulares—121	
4.6	Conclusiones	131
	Apéndice	133
	Bibliografía	135

4.1 Introducción

El fenómeno de la descarga corona **pulsada** fue descubierto por Trichel^{1,2} y Kip^{3,4} en 1938 como resultado de las observaciones realizadas por Loeb⁵, quien advertía, bajo ciertas condiciones, la posibilidad de aparición de discontinuidades en la corriente de una descarga corona (punta-plano). Hasta entonces, se asumía que este tipo de descargas eran un fenómeno continuo a presiones elevadas (como la atmosférica). Fue el propio Loeb quien sugirió a Trichel^a comprobar que la descarga corona podía descomponerse en una secuencia de múltiples *streamers*. En efecto, los trabajos llevados a cabo por Trichel y Kip revelaron que en determinadas condiciones la descarga corona (positiva y negativa) adoptaba la forma de pulsos de corriente, a pesar de que la tensión aplicada entre los electrodos era constante. La frecuencia de estas pulsaciones variaba con la tensión aplicada, el radio de curvatura de la punta o la polaridad del electrodo, en el rango de kHz a MHz.

En particular para la descarga corona negativa, Trichel¹ sugiere que la densidad de carga producida en el desarrollo de la descarga puede llegar a distorsionar de forma significativa el campo eléctrico externo, e incluso apantallarlo por completo en el caso de gases electronegativos (como es el O₂). El efecto de las sucesivas avalanchas acumula los iones positivos en las proximidades del cátodo, mientras que la carga negativa queda a cierta distancia del electrodo, donde la capacidad de ionización es pequeña en comparación con la captura electrónica. Las explicaciones de Trichel señalan, de forma cualitativa (véase Fig. 4.1-1), al barrido de la carga negativa como el principal mecanismo que regula la frecuencia de los pulsos. De sus observaciones se deduce por qué este tipo de pulsaciones repetitivas no aparecen en gases electropositivos, donde la carga negativa está formada exclusivamente por electrones, ya que éstos se eliminan rápidamente a través del electrodo.

En la práctica existe una gran variedad de aplicaciones basadas en la descarga corona (Goldman y Goldman⁶) que requieren de una comprensión más profunda de los aspectos físicos y químicos que tienen lugar durante la misma y, en particular, durante el régimen de **pulsos de Trichel** de la corona negativa. Así, por ejemplo, la descarga corona se utiliza como fuente de iones en aplicaciones electrostáticas, en la síntesis de especies químicas (por ejemplo, ozono), en el tratamiento industrial de superficies, etc. En otras ocasiones, la presencia de la descarga corona es indeseada. Tal es el caso de la descarga que se produce en los conductores de las líneas de transmisión de

^a Al menos, así aparece en el artículo de Kip³.

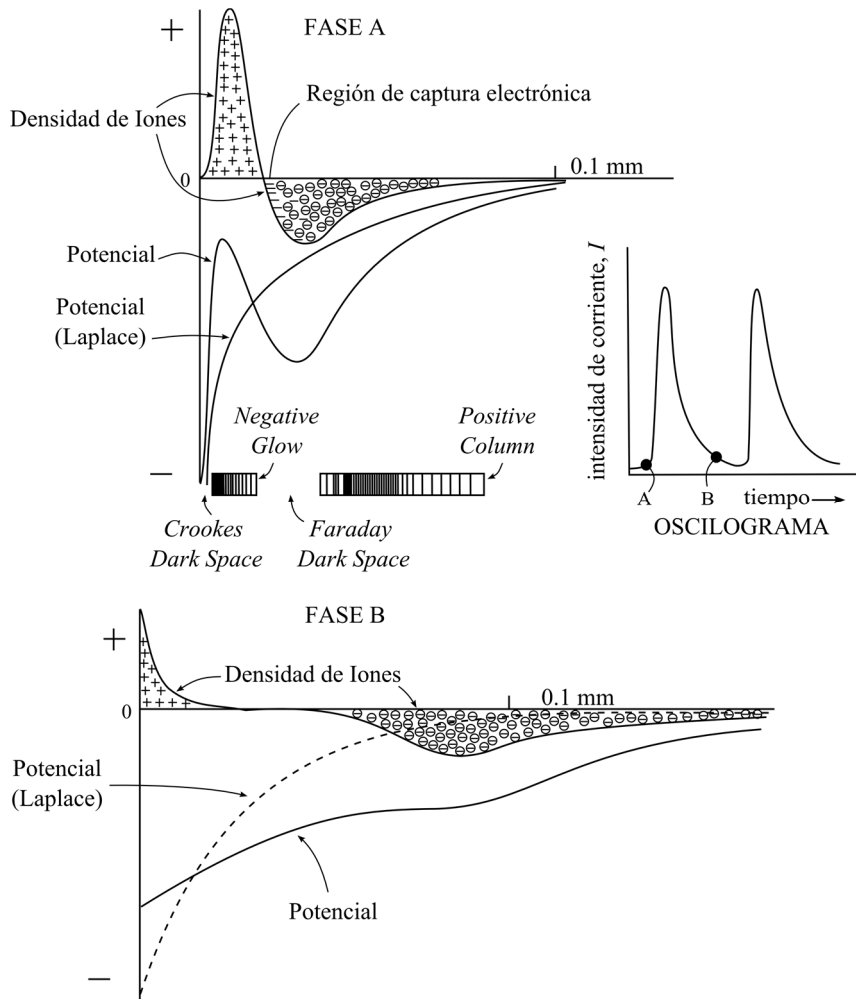


Fig. 4.1-1: Descripción cualitativa de la distribución de carga antes y después de las sucesivas avalanchas que forma el pulso de corriente (Trichel¹).

alta potencia, en las que la pérdida de potencia debida a la descarga corona puede llegar a ser comparable a las pérdidas óhmicas⁷. Además, el hecho de que la frecuencia de las pulsaciones de Trichel se encuentre en el rango de RF (radiofrecuencias) puede afectar a la calidad de las telecomunicaciones en su entorno.

Debido a este interés práctico, durante las últimas tres décadas se han realizados muchos estudios que han tratado de explicar la naturaleza de los pulsos de Trichel y reproducir su carácter periódico⁸⁻¹⁵. Sin embargo, la simulación del desarrollo de la descarga constituye un reto numérico, en tanto que supone controlar múltiples escalas de espacio y tiempo, además de las dificultades introducidas por los términos de reacción. El trabajo de Davies et al.¹⁶, aun cuando no trataba específicamente el problema de los

pulsos de Trichel, es quizás uno de los primeros estudios significativos en este campo. El modelo simulado por estos autores analizaba la propagación de *streamers* entre electrodos planos y paralelos haciendo uso de un modelo reducido de dos especies (electrones e iones positivos), y explotando el carácter filamentario de la descarga para simplificar el cálculo del campo eléctrico por medio del método de los discos¹⁷. La esencia del modelo consistía en simular el problema de transporte en 1D (a lo largo del eje que une los electrodos) y usar los valores de las diferentes densidades en cada punto del eje para construir discos de densidad de carga uniforme sobre el canal de la descarga. De este modo, el campo eléctrico se resolvía en 2D y el problema de transporte en 1D (modelo 1.5D). Este modelo simplificado mostraba, por un lado el papel determinante que desempeña la distorsión del campo eléctrico en el desarrollo de la descarga y, por otra parte la importancia de la interacción entre la radiación emitida en la descarga y el desarrollo de los *streamers* a través de la emisión secundaria de electrones en los electrodos.

Posteriormente, Morrow⁸ adaptó el modelo de Davies et al.¹⁶ al estudio del desarrollo espacio-temporal de los pulsos de Trichel en oxígeno a baja presión, utilizando para ello esquemas de alta resolución en diferencias finitas (FD) con limitadores del tipo *flux-corrected transport*¹⁸ (FCT). El modelo de Morrow consideraba tres especies (electrones e iones positivos y negativos) e incluía la emisión secundaria de electrones por medio del impacto de iones positivos y fotones en el cátodo. No obstante, el modelo solo reproducía el primer pulso que, a diferencia de los posteriores, se desarrolla en una región libre de carga.

Algunos años más tarde, el trabajo de Napartovich et al.⁹ extendió el problema de Morrow reproduciendo algunos pulsos de Trichel (0.1 ms). Por sencillez, el modelo ignoraba la difusión de los electrones y consideraba la emisión secundaria inducida exclusivamente por el impacto de los iones positivos. Sin embargo, una diferencia significativa con los modelos precedentes era el hecho de considerar el radio del canal de la descarga como una función de la distancia al ánodo.

Más recientemente, el trabajo de Soria et al.¹⁹ implementa *el método de las partículas* (PIC) para estudiar el desarrollo de las descargas, comparando los resultados obtenidos en el problema de Morrow mediante FCT en FD y PIC. En trabajos posteriores, los autores mejoran la técnica usada y simulan un tren de pulsos de Trichel^{12,13}. La ventaja principal de este método (PIC) radica en su escasa difusión numérica, aunque como contrapartida requiere un mayor esfuerzo de cálculo.

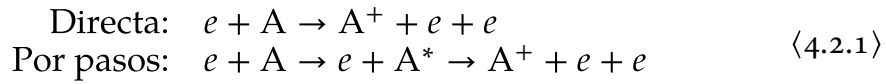
Este resumen esquemático de la evolución de las simulaciones de los pulsos de Trichel en los últimos años pone de manifiesto la necesidad de explorar el papel de las diferentes especies producidas en la descarga, más allá

de los modelos reducidos con especies genéricas (electrones e iones positivos y negativos). En este contexto, es un hecho conocido que a lo largo del desarrollo de la descarga se producen una gran variedad de especies (electrones, iones, estados excitados, estados metaestables, estados vibracionales...). Este capítulo analiza la evolución de los pulsos de Trichel en oxígeno desde una perspectiva plasma-química²⁰. Para ello se definirá un modelo químico de 10 especies ($e, O_2^+, O_4^+, O^-, O_2^-, O_3^-, O, O_2(^1\Delta_g), O_3$ y O_2) acopladas entre sí por medio de un sistema de 24 reacciones entre las que se incluyen los procesos elementales más importantes que tiene lugar en la descarga.

4.2 Formulación del problema

Construcción de un modelo químico consistente

Entre los procesos elementales que describen la cinética química de las descargas, la **ionización** desempeña un papel fundamental en la descripción de éstas. Existen dos mecanismos por los que este tipo de procesos puede tener lugar²¹⁻²⁴: **ionización directa** e **ionización por pasos**,



El segundo caso, a diferencia del primero, puede ocurrir en varias etapas, debido a la necesidad de producir previamente los estados neutros excitados de alta energía. Para estimar, de forma cuantitativa, la razón entre estas dos tasas seguiremos los argumentos de Smirnov²¹, en los que se asume que la transferencia energética de un electrón libre en el plasma a un electrón de valencia es del orden de T_e (ec. <2.6.9>), siendo T_e la temperatura electrónica. De este modo, si existen niveles energéticos asociados a los estados excitados en el rango $(\mathcal{I} - T_e, \mathcal{I})$, donde \mathcal{I} representa la energía de ionización, entonces en el contexto de una aproximación de LTE, se obtiene²¹

$$\frac{k_i^{(\text{pasos})}(T_e)}{k_i^{(\text{directa})}(T_e)} \approx \left(\frac{\mathcal{I}}{T_e} \right)^{7/2}, \quad (4.2.2)$$

Típicamente la razón \mathcal{I}/T_e es del orden de 10, lo que significa que la ionización por pasos puede llegar a ser entre 10^3 y 10^4 veces más rápida que el mecanismo de ionización directa. Por este motivo, como se indicaba en §1.1 y §1.2, éste es un proceso fundamental para entender la dinámica de los *streamers*. Sin embargo, en el caso de la descarga corona con sobrevoltajes moderados, los estados excitados alcanzan, en el mejor caso, una densidad de $10^{-6} \times N_{gas}$ (donde N_{gas} es la densidad del gas). Es por esto por lo que la

ionización directa predomina sobre la ionización por pasos, ya que

$$Q_i^{(\text{directa})} = k_i^d n_e N_{\text{gas}} \gg k_i^p n_e n_* = Q_i^{(\text{pasos})}, \quad \langle 4.2.3 \rangle$$

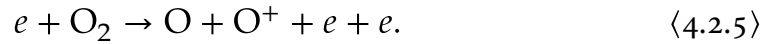
donde n_* representa la densidad de estados excitados.

Dado que el O₂ es una molécula diatómica, es necesaria alguna consideración adicional respecto del proceso de ionización directa. Ésta puede ocurrir de dos formas: como **ionización no disociativa** o como **ionización disociativa**. La vía de ionización no disociativa,



ocurre cuando la energía de los electrones no excede significativamente la energía de ionización de la molécula de O₂ ($\mathcal{I}(\text{O}_2) \approx 12 \text{ eV}$). El tiempo de interacción entre el electrón y la molécula puede estimarse como $a_0/u_e \sim (10^{-16} - 10^{-15}) \text{ s}$, donde u_e es la velocidad media del electrón y a_0 el radio atómico. En cambio, las vibraciones internas^b de los átomos en la molécula tienen períodos típicos de $(10^{-14} - 10^{-13}) \text{ s}$. Por tanto, las transiciones electrónicas estimuladas por impacto de un electrón (incluyendo la ionización molecular) ocurren en una escala de tiempo mucho más rápida que la correspondiente a la vibración molecular. Como consecuencia de ello, puede entenderse que los átomos permanecen “congelados” durante la transición electrónica (**principio de Frank-Condon**²²).

Por otra parte, cuando la energía de los electrones es elevada y excede sustancialmente el potencial de ionización, la ionización puede ocurrir a través de la vía disociativa,



Sin embargo, este mecanismo de ionización directa requiere electrones más energéticos ($\mathcal{I}(\text{O}_2) \approx 23 \text{ eV}$) y, por tanto, puede despreciarse en primera aproximación ya que jugará un papel secundario (véase Fig. 4.2-1, Itikawa²⁵).

La ionización directa, en general, desempeña un papel crucial como mecanismo para “capturar” las componentes más elevadas de energía suministradas por la fuente^c. Sin embargo, en presencia de un campo eléctrico no uniforme, como es el caso de la descarga corona, es necesario

^b Se utiliza la vibración atómica como referencia, ya que constituye el modo más rápido en lo que respecta al movimiento de los átomos en la molécula.

^c Se interpreta aquí los electrones en el gas como el principal portador de la energía suministrada por la fuente de alimentación. Por tanto, “las componentes más altas de energía” se refiere a la función de distribución de energía electrónica (EEDF), entendiendo que una buena parte de ésta cae fuera del rango energético para la ionización directa. De ahí que sea necesario considerar otros mecanismos de captura energética (*energy branching*) para el caso de electrones “lentos”.

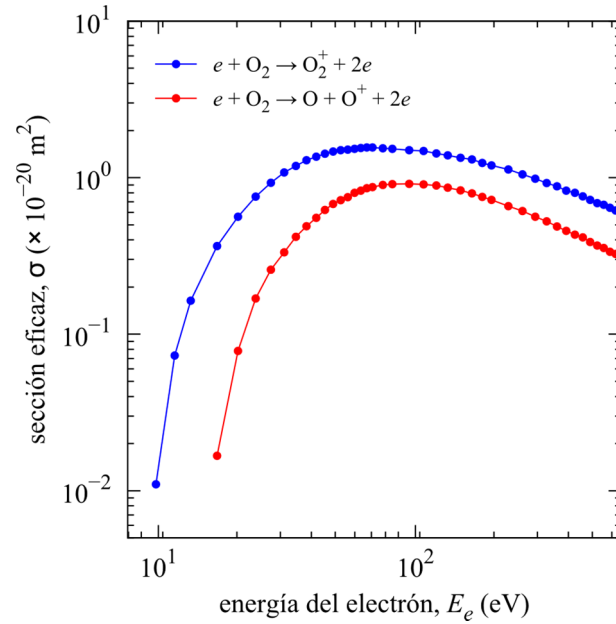
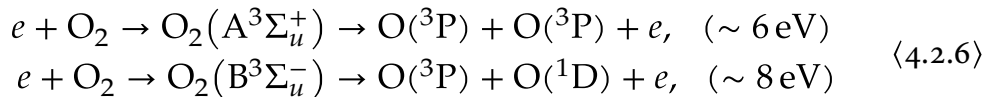


Fig. 4.2-1: Sección eficaz de ionización directa. Los datos se han del tomados del trabajo de Itikawa²⁵.

considerar otro tipo de mecanismos a través de los cuales se capture la energía de la fuente (*energy branching*). La representación de los diferentes procesos alternativos, en el rango de bajas energías, permite definir un modelo cerrado y consistente en relación con los aspectos físico-químicos de la descarga. En el caso de la descarga en oxígeno, siguiendo los cálculos de Eliasson y Kogelschatz²⁶ puede verse que (Fig. 4.2-2), a bajas energías, los procesos de disociación (superposición de procesos en torno a 6 y 8 eV, ver Fig. 4.2-3):



“atrapan” aproximadamente el 80% de la energía electrónica. Por sencillez, prescindiremos del segundo proceso de disociación en $\langle 4.2.6 \rangle$, ya que requiere una mayor energía umbral. Por otra parte, de acuerdo con la Fig. 4.2-2, se incorpora la formación del estado excitado $\text{O}_2(\text{}^1\Delta_g)$, cubriendo a sí prácticamente la totalidad de las pérdidas energéticas. Así mismo, dado que la formación de los estados vibracionales solo tienen una contribución significativa en una estrecha región dentro del rango de energías más bajas (Fig. 4.2-2), no se tendrán en cuenta en primera aproximación. No obstante, otros procesos como la captura electrónica, a pesar de tener una importancia relativamente pequeña en las pérdidas directas, pueden desempeñar un papel crucial en el desarrollo de la descarga por medio de la distribución de carga neta y su efecto sobre el campo eléctrico externo. De ahí la incorporación de

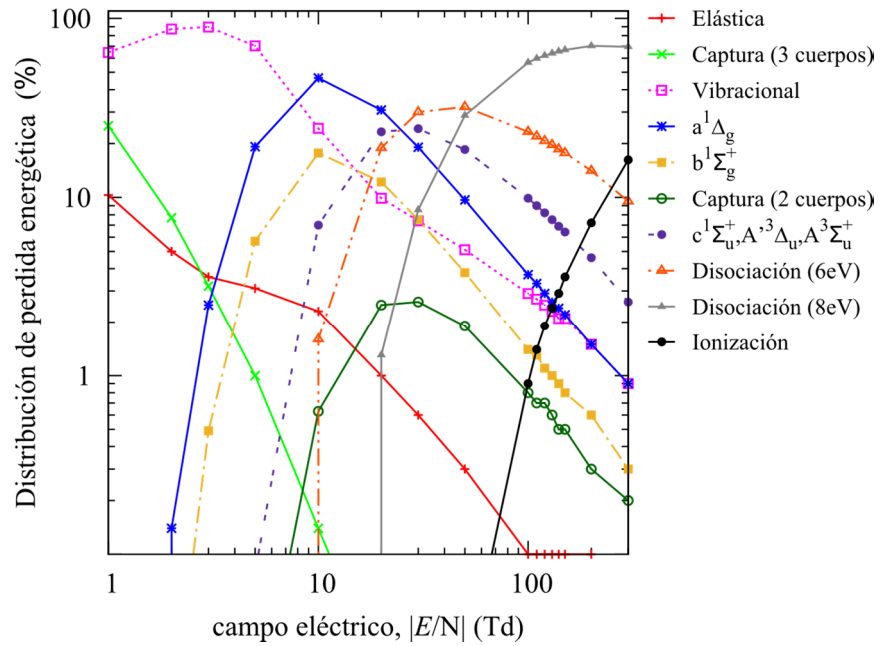


Fig. 4.2-2: Distribución de pérdidas energéticas basada en los cálculos de Eliasson y Kogelschatz²⁶.

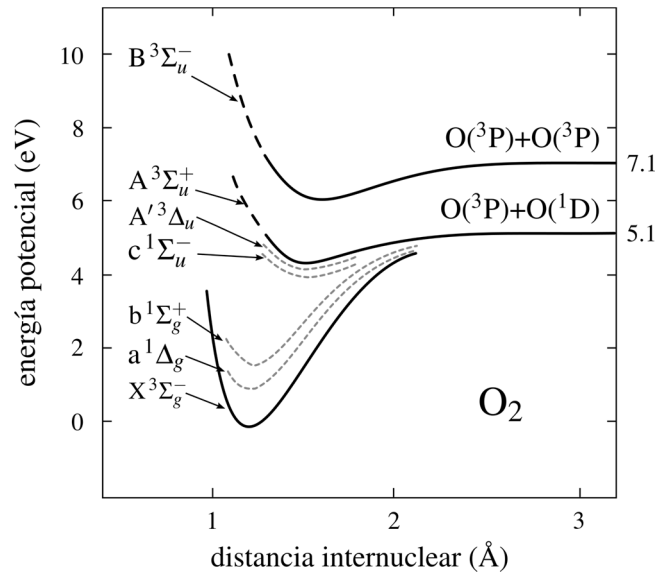
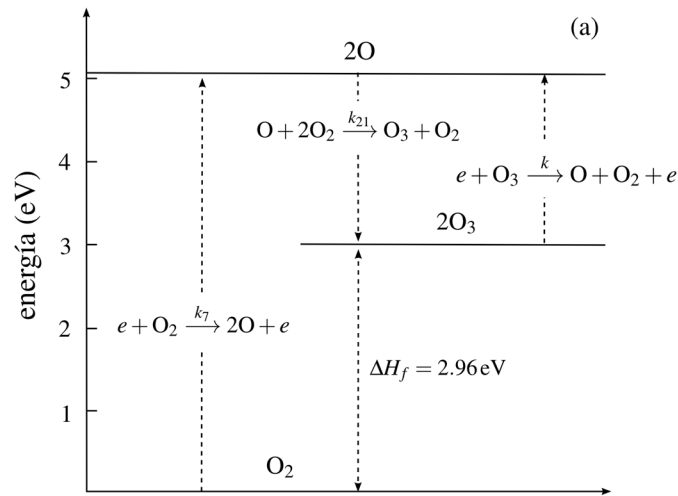


Fig. 4.2-3: Modelo simplificado de los niveles de energía para los estados neutros del O₂ en la región de Frank-Condon (el diagrama completo puede verse en apéndice, Krupenie⁵²).

los iones negativos a tenor de los procesos considerados en la Fig. 4.2-2.

El hecho de considerar el ozono en el modelo responde a dos aspectos fundamentales: el primero de ellos, como se muestra en la Fig. 4.2-4-(a), se debe a la estrecha relación que existe entre el proceso de formación de ozono



O_2 : Disociación (k_7) = 5.16 eV

O_3 : Disociación (k) = 1.10 eV

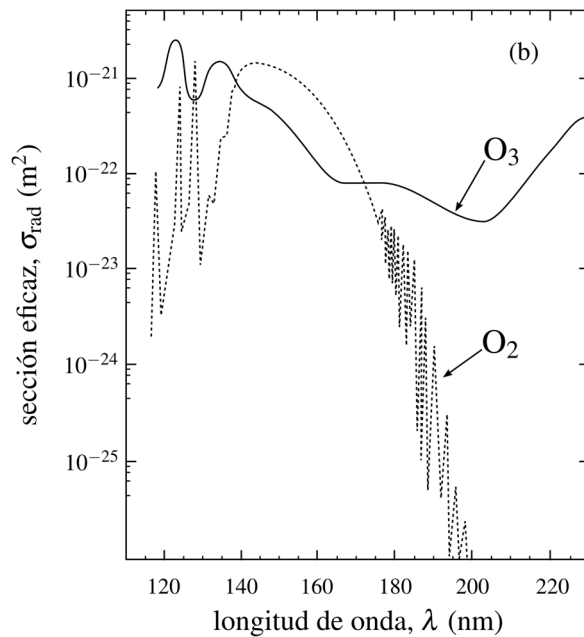


Fig. 4.2-4: (a) Representación esquemática del proceso de formación de ozono en oxígeno y su relación con el mecanismo de disociación (Eliasson y Kogelschatz²⁶). (b) Sección eficaz para la absorción de radiación (Eliasson y Kogelschatz²⁶).

y el mecanismo de disociación de O_2 , siendo este último uno de los procesos fundamentales señalados anteriormente. El otro aspecto está relacionado con la absorción de radiación por parte del O_3 . Aunque el modelo no contempla, por sencillez, el efecto que la radiación tiene en el desarrollo de la descarga, el ozono representa una de las principales especies implicadas en la absorción

energética de la radiación en el rango UV (Fig. 4.2-4-(b)). Además, su poder de oxidación la convierte en una especie de interés en numerosas aplicaciones prácticas.

Las consideraciones hasta aquí expuestas sirven para definir las líneas generales del modelo plasma-químico. Sin embargo, éste debe completarse con la inclusión de todos los procesos importantes que involucren a las especies consideradas. La selección de dichos procesos se ha realizado teniendo presente la importancia de sus tasas de reacción. Así mismo, se han considerado los resultados obtenidos en estudios previos de la descarga corona estacionaria¹⁹, donde se realiza una selección de aquellas reacciones

Tabla 4.2-1: Modelo simplificado de la cinética química de los pulsos de Trichel en O₂.

Nº(ref.)	Reacción	Cte. de reacción, k (cm ³ s ⁻¹)
R0 ²⁷	$e + O_2 \rightarrow O_2 + e$	$f(E/N)$
R1 ²⁸	$e + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2e$	$f(E/N)$
R2 ²⁷	$e + O_2 \rightarrow O^- + O$	$f(E/N)$
R3 ²⁹	$e + O_3 \rightarrow O^- + O_2$	$f(E/N)$
R4 ²⁹	$e + O_3 \rightarrow O_2^- + O$	$f(E/N)$
R5 ²⁹	$e + 2O_2 \rightarrow O_2^- + O_2$	$f(E/N)$
R6 ²⁶	$e + O_2(^1\Delta_g) + O_2 \rightarrow O_2^- + O_2$	$1.9 \times 10^{-30}[O_2]$
R7 ²⁷	$e + O_2 \rightarrow 2O + e$	$f(E/N)$
R8 ²⁷	$e + O_2 \rightarrow O_2(^1\Delta_g) + e$	$f(E/N)$
R9 ²⁶	$O_2^- + O_2(^1\Delta_g) \rightarrow 2O_2 + e$	2.0×10^{-10}
R10 ²⁶	$O_3^- + O_3 \rightarrow 3O_2 + e$	1.0×10^{-12}
R11 ²⁶	$O_3^- + O \rightarrow 2O_2 + e$	1.0×10^{-13}
R12 ²⁶	$O^- + O_2 \rightarrow O + O_2 + e$	$f(E/N)$
R13 ²⁶	$O^- + O_2 \rightarrow O_3 + e$	5.0×10^{-15}
R14 ²⁶	$O^- + O_2 \rightarrow O_2^- + O$	$f(E/N)$
R15 ²⁶	$O_2^- + O_3 \rightarrow O_3^- + O_2$	4.0×10^{-10}
R16 ²⁶	$O^- + O_3 \rightarrow O_3^- + O$	5.3×10^{-10}
R17 ²⁶	$O^- + 2O_2 \rightarrow O_3^- + O_2$	$1.1 \times 10^{-30}(300/T)[O_2]$
R18 ²⁶	$O_2^+ + 2O_2 \rightarrow O_4^+ + O_2$	$2.4 \times 10^{-30}(300/T)^{3.2}[O_2]$
R19 ²⁶	$O_4^+ + O_2 \rightarrow O_2^+ + 2O_2$	$3.3 \times 10^{-6}(300/T)^4 e^{-5030/T}$
R20 ²⁶	$O_4^+ + O \rightarrow O_2^+ + O_3$	3.0×10^{-10}
R21 ²⁶	$O + 2O_2 \rightarrow O_3 + O_2$	$6.40 \times 10^{-35} e^{663/T}[O_2]$
R22 ²⁶	$O + O_3 \rightarrow 2O_2$	$1.81 \times 10^{-11} e^{-2300/T}$
R23 ²⁶	$O_2(^1\Delta_g) + O_2 \rightarrow 2O_2$	$2.2 \times 10^{-18}(T/300)^{0.8}$
R24 ²⁶	$O_2(^1\Delta_g) + O_3 \rightarrow O + O_2 + O_2$	$5.2 \times 10^{-11} e^{-2840/T}$

cuya contribución a la cinética plasma-química es superior al 1%.

El resultado de este proceso de selección queda recogido en la Tabla 4.2-1 donde se muestra el conjunto simplificado de reacciones utilizadas para estudiar la cinética química de los pulsos de Trichel en O_2 . Dado que algunas reacciones dependen del campo eléctrico, en la Fig. 4.2-5-(a) se han representado las secciones eficaces de los procesos por impacto electrónico

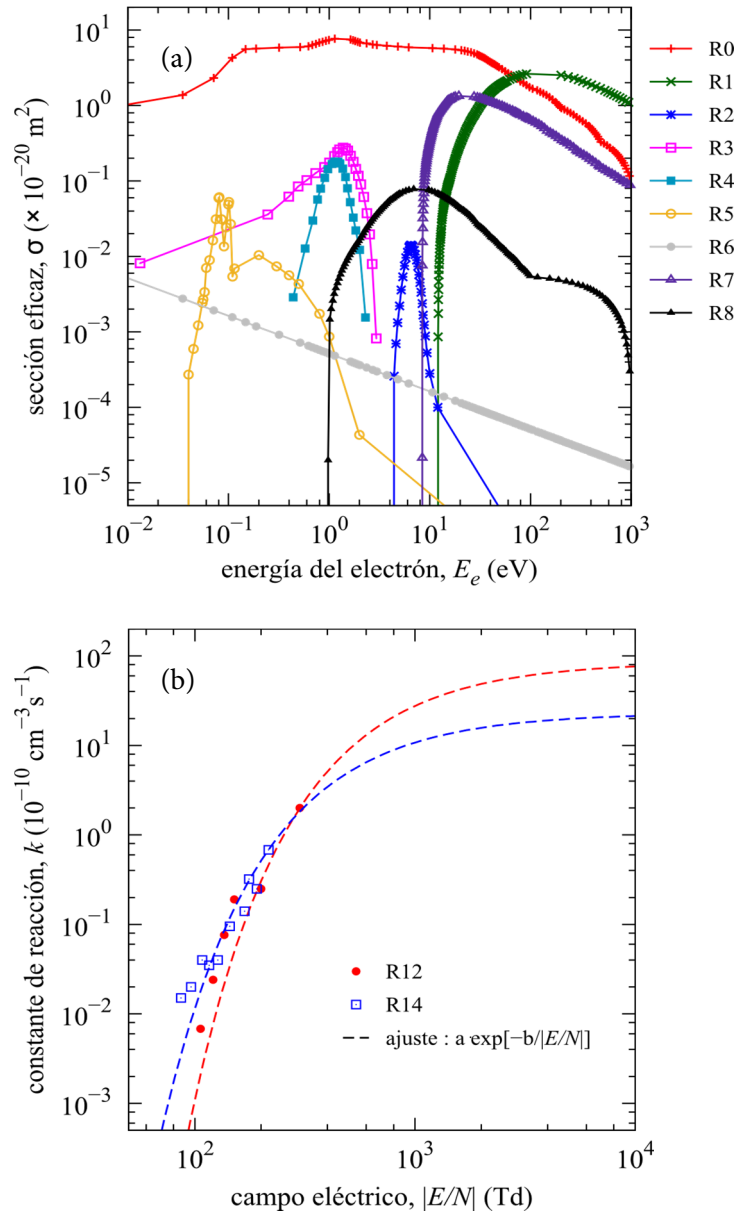


Fig. 4.2-5: (a) Secciones eficaces de los procesos por impacto electrónico incorporados en el modelo (LXCat⁺²⁷⁻²⁹). (b) Constantes de reacción como función del campo eléctrico para R12 y R14 (Eliasson y Kogelschatz²⁶).

(LXCat²⁷⁻²⁹). Por otra parte, en la Fig. 4.2-5-(b) se muestran las tasas de reacción R₁₂ y R₁₄ como función del campo eléctrico reducido (Eliasson y Kogelschatz²⁶).

Descripción multifluida: una cuestión de escalas

Como toda aproximación, al usar la descripción fluida en el caso de las descargas deben establecerse ciertos límites fuera de los cuales el modelo no tiene sentido. Para entender el ámbito de la aproximación fluida en el contexto de los pulsos de Trichel pueden utilizarse algunos de los resultados obtenidos en el capítulo 2. Sin embargo, antes de ir desgranando las implicaciones de estos resultados, conviene rescatar una parte de lo visto en el capítulo 3 en lo que respecta a las dificultades numéricas.

Las ecuaciones macroscópicas para la descarga pueden reducirse a un sistema de ecuaciones de continuidad con términos “fuentes” y “sumideros”, donde los términos de flujo se descomponen en una contribución de arrastre (debida al campo eléctrico) y otra de difusión (debida a las colisiones moleculares). Desde un punto de vista matemático esto significa reducir la dinámica de las especies a una relación del tipo convección-difusión-reacción (CDR). En el capítulo 3 se mostró, para un caso concreto, las dificultades numéricas derivadas de la naturaleza de estas ecuaciones. No obstante, desde una perspectiva numérica, todas estas dificultades son una consecuencia de la imposibilidad de implementar la ecuación diferencial (ED) sin cometer errores en la discretización. Si pudiéramos resolver la ecuación con $h \rightarrow 0$, los problemas numéricos derivados de los errores de discretización deberían desaparecer (al margen de inestabilidades inherentes a la ecuación diferencial). En efecto, la condición de **consistencia** implícita en el método (FEM) garantiza que para $h \rightarrow 0$ se resolvería exactamente la ED. Aunque, otra cosa muy distinta sería el sentido físico de la solución así obtenida. Sin embargo, como se muestra a continuación, la elección del tamaño de la malla (y con ello todo lo que supone en términos de errores numéricos) está determinada por la validez de la aproximación fluida. Por tanto ecuación diferencial equivalente (EDE), discretización espacial y temporal, errores numéricos y aproximación fluida deben tratarse como un todo para integrar una imagen coherente de la descarga.

En la Fig. 4.2-6 se muestra una representación esquemática de las diferentes escalas espaciales, la relación entre éstas y las condiciones para una descripción fluida consistente. El concepto de **longitud de Debye** (véase §2.3, ec. (2.3.15)) define la distancia a partir de la cual dos partículas dejan de estar correlacionadas vía interacción de Coulomb. Este punto define un límite (inferior) en lo que respecta a la validez de la aproximación de **campo medio**. A partir de éste es posible simplificar el estudio del campo eléctrico por medio

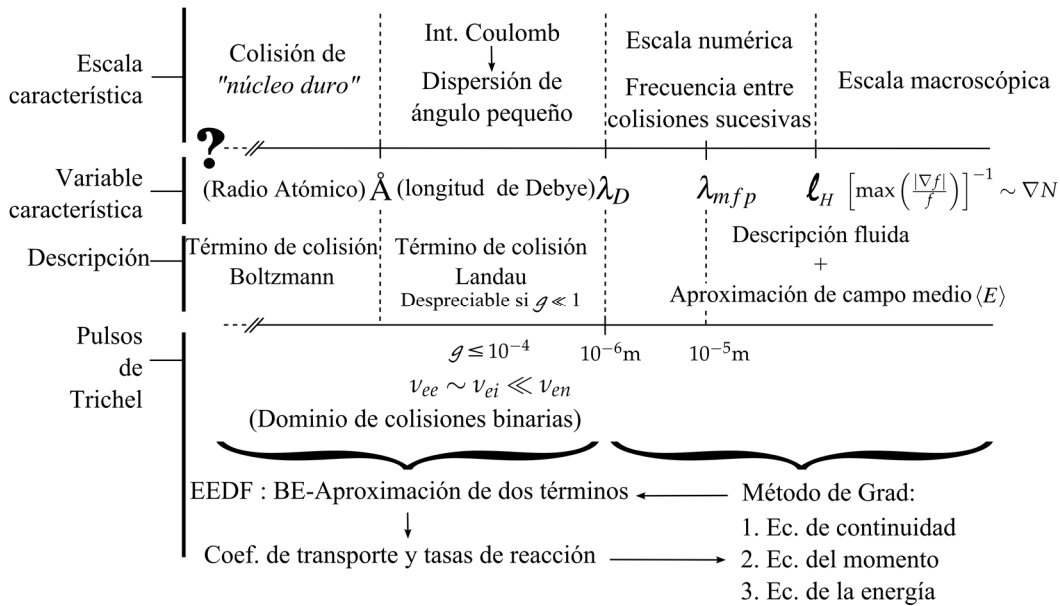


Fig. 4.2-6: Descripción esquemática de la aproximación fluida para estudiar la evolución de los pulsos de Trichel en el contexto del régimen hidrodinámico.

de una distribución de carga "media", de tal modo que cada una de las partículas cargadas solo experimenta el campo creado por todas las restantes. Como resultado de ello se obtiene una ecuación de Poisson similar a la situación macroscópica (véase §2.3-§2.4, ec. (2.4.3)). En estas condiciones, siempre que se mantenga el **régimen hidrodinámico** (véase §2.3, ec. (2.3.22)-(2.3.23))

$$\ell_c \ll \lambda_D \sim \lambda_{mfp} \ll \ell_H, \tag{4.2.7}$$

una escala intermedia entre λ_D y ℓ_H parece un buen punto para definir h . De este modo, la escala hidrodinámica puede resolverse adecuadamente y por otra parte la escala asociada a λ_D sería imperceptible al modelo fluido. Esto resultaría en una imagen fluida coherente. Sin embargo, en ocasiones la escala hidrodinámica requiere algún refinamiento en la malla capaz de resolver distancias del orden de λ_D , como es el caso de los frentes de choque desarrollados en las proximidades del electrodo en §3.6. Este es un punto de contacto con el problema numérico, ya que en tal caso los nodos de un elemento están situados a una distancia de λ_D , y con ello el condicionamiento del sistema de ecuaciones podría verse afectado drásticamente. Por este motivo, para seguir usando la aproximación de campo medio en el interior de cada elemento es necesario establecer que el efecto de estas correlaciones es despreciable. Para aclarar esta situación es posible dividir las interacciones dentro de la esfera de Debye en dos tipos (véase §2.3): interacciones de corto

alcance (colisiones de “núcleo duro”) e interacciones de largo alcance (interacción de Coulomb). El efecto de estas últimas es el único preocupante en relación con la malla, ya que las colisiones de núcleo duro tienen una escala característica del orden del Ångström. En este sentido, la ecuación (2.3.19) muestra que estos *modos colectivos* pueden despreciarse cuando $g \ll 1$. En el caso de las descargas, y en el marco de gases débilmente ionizados, se cumple que $g \leq 10^{-4}$ (véase §2.3), por lo que estos modos colectivos pueden despreciarse siempre que el sistema esté, al menos, en equilibrio termodinámico local (LTE). Por otra parte, en situaciones fuera del equilibrio, la relación (2.3.9) muestra que el efecto de las correlaciones de largo alcance es despreciable, lo que indica el predominio de las colisiones binarias y la validez de la BE en el caso de las descargas. No obstante, esta condición está sujeta a la restricción de régimen hidrodinámico. Por tanto, dado que ambos criterios tienen alguna limitación para definir con claridad la validez del modelo fluido con $h < \lambda_D$, se tomará λ_D como límite inferior de la escala numérica. Este hecho es crucial a la hora de elegir el esquema numérico, a tenor de las inestabilidades que pueden introducir los términos de reacción (una discusión detallada del impacto numérico de los términos de reacción en la discretización espacial y temporal del problema puede verse en §3.6).

Ecuaciones fluidas. Aproximaciones

Las 13 magnitudes que definen la aproximación fluida (método de Grad, véase §2.5) para cada especie, pueden concentrarse en una ecuación CDR bajo determinadas condiciones. A continuación se enumeran cada una de estas simplificaciones:

1. Plasma no magnetizado: Típicamente los valores de corriente eléctrica en el caso de la descarga corona no superan los mA. En particular, la región de los pulsos de Trichel se caracteriza por corrientes del orden de μA . En estas condiciones puede prescindirse de los efectos magnéticos en (2.3.18).
2. Dispersión elástica dominante: En las condiciones de la descargas corona (véase Fig. 4.2-5-(a)), la dispersión elástica constituye el principal mecanismo que contribuye a la fricción neta debido al efecto de las colisiones (véase §2.5).
3. Fuerzas macroscópicas: Los términos de aceleración, $\partial \mathbf{u}_\alpha / \partial t$, en (2.5.5) pueden despreciarse dado que se supone que tanto el campo eléctrico como cualquier otra fuerza macroscópica varían lentamente en comparación con la dinámica de la descarga (régimen hidrodinámico, véase §2.3 ec. (2.3.22)–(2.3.23)). Por otra parte el término inercial, $\mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u}_\alpha$ en (2.5.5), bajo dispersión elástica dominante y en régimen

hidrodinámico, tenderá a ser menor (tanto más a presiones superiores) que el términos de colisión a la derecha de (2.5.5). Esto es debido a la isotropía que introduce el efecto de las colisiones sobre \mathbf{u}_α a escala macroscópica. Como resultado de ello la ecuación para la conservación del momento puede reescribirse con la forma:

$$0 \approx q_\alpha n_\alpha \mathbf{E} - \nabla \cdot \mathbf{P} - m_\alpha n_\alpha \nu_m \mathbf{u}_\alpha, \quad \langle 4.2.8 \rangle$$

- donde $m_\alpha, q_\alpha, \nu_m$ y n_α , representan la masa, carga, frecuencia de colisiones elásticas (α – gas) y densidad de la especie, respectivamente.
4. Plasma *templado* (*warm plasma*³⁰): Esta simplificación supone que la temperatura es suficientemente baja como para despreciar los momentos asociados a la velocidad térmica en comparación con la componente de arrastre. Como consecuencia de ello solo se contempla el efecto de una presión escalar, despreciando así todos los términos no diagonales del tensor de presiones (ec. (2.5.6)). En estas condiciones, en el límite isotérmico ($\nabla p_\alpha = k_B T_\alpha \nabla n_\alpha$), la conservación del momento para la especie α (ec. (4.2.8)) puede reescribirse de la forma:

$$\Gamma_\alpha = n_\alpha \mathbf{u}_\alpha = \pm n_\alpha \mu_\alpha \mathbf{E} - \nabla (\mathcal{D}_\alpha n_\alpha), \quad \langle 4.2.9 \rangle$$

donde $\mu_\alpha = |q_\alpha| / (m_\alpha \nu_\alpha)$ y $\mathcal{D}_\alpha = k_B T_\alpha / (m_\alpha \nu_\alpha)$ representan el coeficiente de movilidad y difusión de la especie α , respectivamente. Finalmente sustituyendo (4.2.9) sobre la ecuación de continuidad correspondiente (ec. (2.5.15)) se obtiene la ecuación CDR para la especie α

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (-\mathcal{D} \nabla n_\alpha + n_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = Q_\alpha, \quad \langle 4.2.10 \rangle$$

- donde $\mathbf{v}_\alpha = \pm n_\alpha \mu_\alpha \mathbf{E}$, representa la contribución de arrastre en (4.2.9).
5. Aproximación de campo medio: En el contexto del régimen hidrodinámico (véase §2.3, ec. (2.3.22)–(2.3.23), subsección previa y Fig. 4.2-6), el acoplamiento entre el campo eléctrico y las ecuaciones fluidas de las diferentes especies puede realizarse por medio de la aproximación de campo medio (§2.4, ec. (2.4.3)). Con ello, las diferentes especies solo perciben un campo medio creado por todas las partículas, lo que conduce a una ecuación de Poisson:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} = -\frac{1}{\epsilon_0} \sum_\alpha q_\alpha n_\alpha, \quad \langle 4.2.11 \rangle$$

siendo ϕ el potencial eléctrico y ϵ_0 la permitividad eléctrica del vacío.

Efectos de superficie. Interacción descarga-electrodo

En general, la interacción que tiene lugar entre el plasma y la superficie de los electrodos es un fenómeno extremadamente complejo³¹⁻³³, en el que están interrelacionados muchos de los parámetros de la descarga, así como de la naturaleza y del estado de la superficie del electrodo. Por este motivo, la interacción de la descarga con las paredes de los electrodos se simplifica sobre la base de las siguientes consideraciones:

1. En relación con las partículas cargadas, se considera que quedan atrapadas en cuanto impactan con la superficie vía **proceso de neutralización de Auger** (§2.6, ec. (2.6.16)).
2. Para los estados excitados (O₂(¹Δ_g)), se asume que el impacto con la pared conduce a un proceso de desexcitación vía **proceso de desexcitación de Auger** (§2.6, ec. (2.6.20)).
3. En lo que respecta a la cinética de los estados adsorbidos, como es el caso de los estados metaestables, se considera que la cinética de **Langmuir-Hinshelwood**³³ es aplicable. Esta aproximación asume que todas las partículas adsorbidas son “acomodadas” en la superficie (en equilibrio térmico) antes de tomar parte en otra reacción. Esta simplificación se complementa con la **aproximación de campo medio** (en el contexto de reacciones catalíticas en superficies), por la que se supone que las diferentes especies adsorbidas se distribuyen aleatoriamente en la superficie sin que exista ningún tipo de interacción entre éstas. Como resultado de ello, pueden desprejarse todos los efectos relacionados con la dinámica de las especies adsorbidas (movilidad, difusión, desorción y recombinación, etc), asociados a la componente tangencial del flujo. Se interpreta así que la interacción con la superficie queda determinada, exclusivamente, por la componente normal del flujo (véase Fig. 4.2-7).

Para implementar las condiciones de contorno se sigue una estrategia similar a la empleada por Hagelaar et al.³⁴, donde se conecta (en el sentido de continuidad) el flujo en el volumen con el flujo en la superficie³⁵ (véase Fig. 4.2-7). Este último puede describirse por medio de la expresión:

$$[\Gamma_\alpha \cdot \mathbf{n}_s]_{\partial\Omega} = \delta_\alpha \left[\frac{1}{4} v_{th,\alpha} n_\alpha + a n_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n}_s - \frac{1}{2} \mathcal{D}_\alpha \nabla n_\alpha \cdot \mathbf{n}_s \right] - (1-a) \sum_k \gamma_k \Gamma_k \cdot \mathbf{n}_s, \quad (4.2.12)$$

donde $\delta_\alpha = 1 - r_\alpha$ (siendo r_α el coeficiente de reflexión), $v_{th,\alpha}$ la velocidad térmica de la especie α , γ_k el coeficiente de emisión secundaria de la especie α a partir de alguna reacción entre la especie k y la superficie del electrodo,

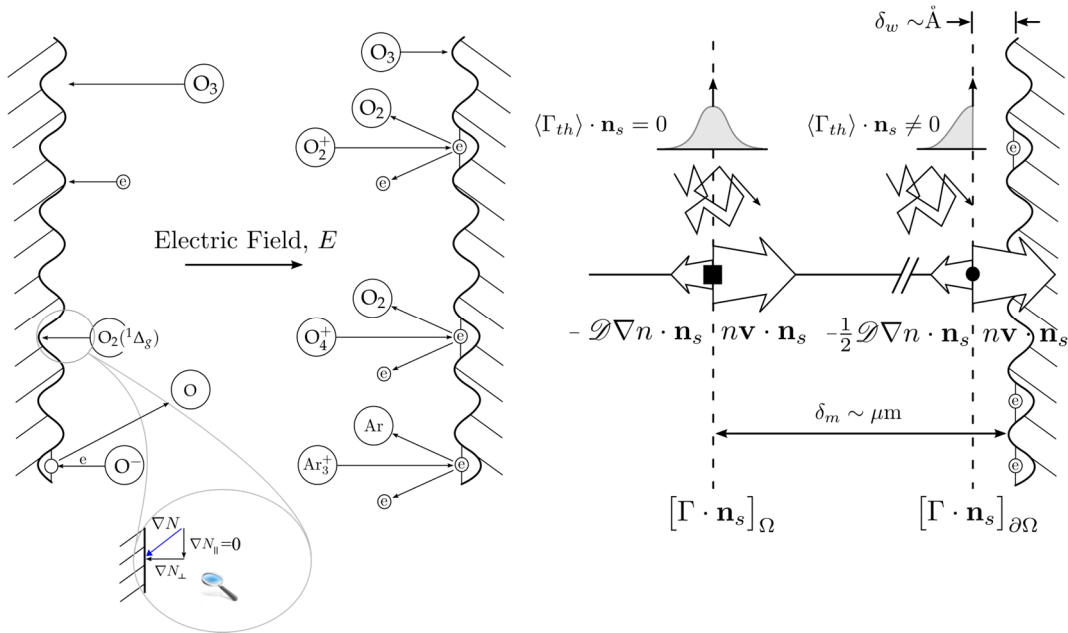


Fig. 4.2-7: Representación esquemática de los procesos de superficie. En la parte derecha el cuadrado negro indica el punto de la malla más cercano a la pared del electrodo, mientras que el círculo negro muestra el punto límite a partir del cual se activa un proceso de Auger (neutralización o desexcitación).

\mathbf{n}_s el vector normal a la superficie apuntado desde el volumen a la superficie y a la función

$$a = \begin{cases} 1 & \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n}_s > 0, \\ 0 & \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n}_s \leq 0. \end{cases} \quad \langle 4.2.13 \rangle$$

Los dos primeros términos en el corchete a la derecha de $\langle 4.2.12 \rangle$ representan el flujo de partículas que impactan con la pared, donde la velocidad se ha descompuesto en su contribución térmica y de arrastre. Esta última refleja el flujo de partículas a través de la pared con velocidad media \mathbf{v}_α , mientras que la componente térmica establece la contribución aleatoria dentro de una región delimitada por el recorrido libre medio desde la pared. El último término del corchete a la derecha de $\langle 4.2.12 \rangle$ representa el flujo por difusión a través de la pared del electrodo. El factor $1/2$ se debe al hecho de que el proceso de difusión en la pared solo tiene lugar en el semiplano que contiene al volumen de la descarga (Fig. 4.2-7). Finalmente el término sumatorio en lado derecho de $\langle 4.2.12 \rangle$ está asociado con las reacciones de superficie de otras especies que conllevan emisión secundaria de la especie α .

De acuerdo con las simplificaciones consideradas en la subsección previa, el flujo de partículas en el volumen puede expresarse como sigue (ec. $\langle 4.2.9 \rangle$)

$$[\Gamma_\alpha \cdot \mathbf{n}_s]_\Omega = n_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n}_s - \nabla(\mathcal{D}_\alpha n_\alpha) \cdot \mathbf{n}_s. \quad \langle 4.2.14 \rangle$$

De manera que imponiendo la condición de continuidad (véase Fig. 4.2-7) entre el último punto de la malla en el volumen y la superficie,

$$[\Gamma_\alpha \cdot \mathbf{n}_s]_\Omega = [\Gamma_\alpha \cdot \mathbf{n}_s]_{\partial\Omega}, \quad \langle 4.2.15 \rangle$$

se obtienen las condiciones de contorno en términos de flujo:

$$[\Gamma_\alpha \cdot \mathbf{n}_s]_\Omega = \frac{\delta_\alpha}{2 - \delta_\alpha} \left[(2a - 1)n_\alpha \mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n}_s + \frac{1}{2}v_{th,\alpha} n_\alpha \right] - \frac{2(1 - a)}{2 - \delta_\alpha} \sum_k \gamma_k \Gamma_k \cdot \mathbf{n}_s. \quad \langle 4.2.16 \rangle$$

4.3 Descripción del modelo

Para simular la cinética química de los pulsos de Trichel se considera que la descarga se desarrolla, en oxígeno puro a 50 Torr y a temperatura ambiente ($T = 298$ K), entre un electrodo semiesférico ($R = 2$ mm) y un plano a tierra (véase Fig. 4.3-1). La punta (el electrodo semiesférico) está conectada a una fuente de alta tensión ($V = -1750$ V), y separada una distancia $d = 20$ mm del plano a tierra. En la Fig. 4.3-1-(b) se muestra el dominio donde se calcula el potencial eléctrico y el modo en que éste se acopla con las ecuaciones de transporte de las especies. Para ello se hace uso del **método de los discos** desarrollado por Davies et al.¹⁷, que representa la distribución de carga en el canal de la descarga mediante discos de densidad uniforme, a partir de la densidad de carga en el eje de simetría. Para motivar este método es necesario considerar la escala temporal de la difusión a través del canal de la descarga, que viene dada por la expresión:

$$\tau_{\text{dif}} \sim \frac{R_{\text{canal}}^2}{\mathcal{D}}, \quad \langle 4.3.1 \rangle$$

donde R_{canal} representa el tamaño del canal de la descarga (véase Fig. 4.3-1) y \mathcal{D} el coeficiente de difusión correspondiente. Para el caso de las especies “pesadas” (iones y especies neutras), $\mathcal{D} \sim 10^{-4}$ m²/s y $R_{\text{canal}} \sim 10^{-3}$ m, por lo que la escala de tiempo de difusión es del orden de 10^{-2} s. En estas condiciones, para tiempos de simulación del orden de 10^{-4} s, puede prescindirse del efecto de difusión para estas especies. Sin embargo, en el caso de los electrones, el coeficiente de difusión puede llegar a ser del orden de $\mathcal{D} \sim 10^{-1}$ m²/s y, con ello, la escala de tiempo de difusión ($\sim 10^{-6}$ s) está dentro de la escala del problema. Por tanto, aun considerando el hecho de que el campo eléctrico en la región del canal está dirigido

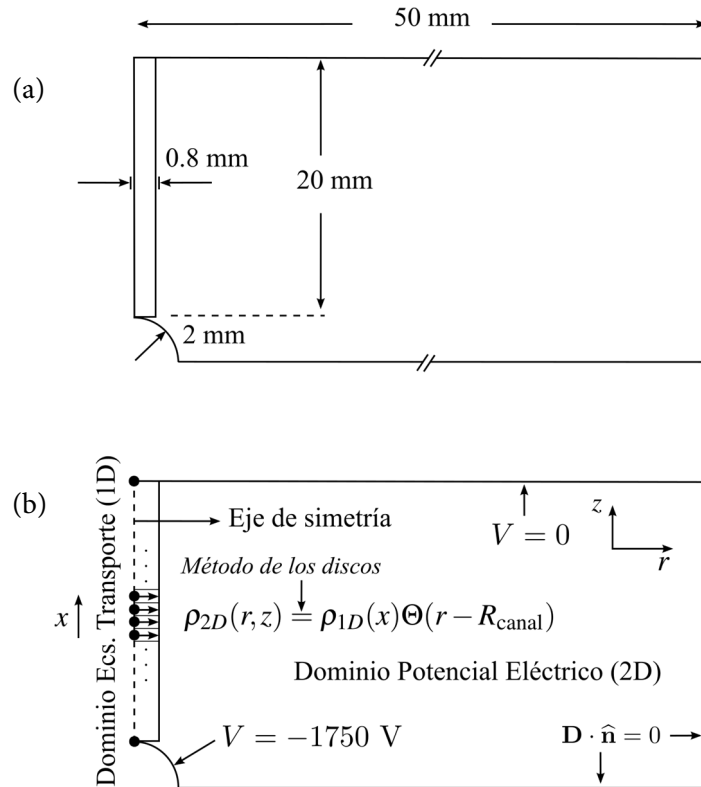


Fig. 4.3-1: (a) Representación de los parámetros geométricos del modelo simulado. (b) Esquema del modelo donde se refleja el acoplamiento entre el problema de transporte (1D) y el cálculo del potencial eléctrico (2D) por medio del *método de los discos* (Davies et al.¹⁷). $\Theta(r - R_{\text{canal}})$ representa una función escalón de 1 a 0 para $r = R_{\text{canal}}$.

predominantemente en la dirección \hat{z} , se requiere alguna aclaración adicional que justifique el carácter uniforme y confinado que el método de los discos atribuye a la densidad de carga. En este sentido se interpreta que la difusión ambipolar actúa conteniendo la carga en dirección radial (véase Fig. 4.3-2). Para cuantificar el efecto de la difusión ambipolar basta tomar la expresión³⁶

$$\mathcal{D}_a = \frac{\mu_e \mathcal{D}_+ + \mu_+ \mathcal{D}_e}{\mu_e + \mu_+}. \quad (4.3.2)$$

Dado que $\mathcal{D}_e \gg \mathcal{D}_+$, y puesto que en el desarrollo de la descarga corona la temperatura de los electrones ($T_e \sim (1 - 20) \text{ eV}$) difiere de la temperatura de los iones (supuestos en equilibrio térmico con el gas, $T_+ \sim T \sim 0.026 \text{ eV}$), se obtiene

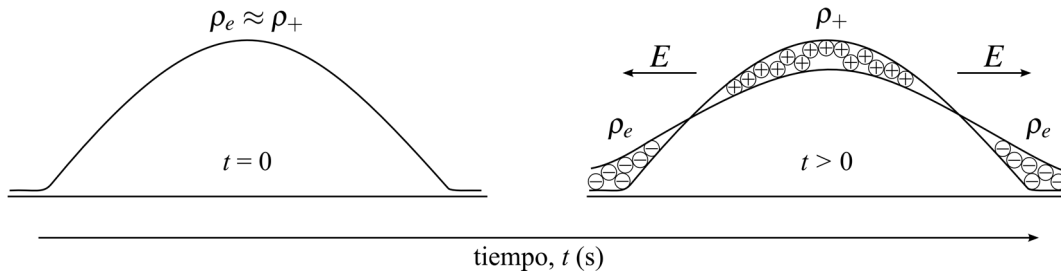


Fig. 4.3-2: Polarización de la descarga en presencia de gradientes en la densidad de electrones.

$$D_a \approx D_+ + D_e \frac{\mu_+}{\mu_e} = D_+ + D_+ \frac{T_e}{T} \approx D_+ \frac{T_e}{T}. \quad (4.3.3)$$

Típicamente el factor T_e/T tiene un orden de magnitud en el rango (200,400). Esto significa que la difusión ambipolar conduce a tiempos característicos del orden de 10^{-4} s. Por tanto, en comparación con la escala de arrastre para los electrones (~ 1 ns), el efecto de la difusión es despreciable. De manera que, en las proximidades del cátodo, la emisión secundaria actúa reponiendo los electrones que salen de un elemento de volumen sin que el efecto de difusión tenga tiempo para actuar. Sin embargo, en la base del concepto de difusión ambipolar se asume la condición

$$\Gamma_e \approx \Gamma_i, \quad (4.3.4)$$

es decir, la igualdad de flujos electrónico e iónico, respectivamente. Esta condición no puede asumirse más allá de cierta distancia del cátodo, por lo que este estudio supone que un canal de radio variable con la distancia al cátodo desempeñará un papel secundario (véase Fig. 4.3-3). Esta simplificación reduce la complejidad numérica del problema extendiendo un canal uniforme a lo largo de la distancia entre electrodos. De este modo el presente estudio resalta la cinética plasma-química en la región próxima al cátodo como precursora de la dinámica de la descarga y relega a un segundo plano el efecto de la difusión de la carga espacial a partir de cierta distancia.

Con estas consideraciones y siguiendo los trabajos de Morrow⁸ y otros investigadores^{37,38}, se modelará el canal de la descarga como un cilindro concéntrico al eje de simetría del problema (véase Fig. 4.3-1) de radio 0.8 mm.

Sistema de ecuaciones de continuidad

Durante el desarrollo de la descarga, la interacción de los electrones con las moléculas del gas (O₂) inicia una cadena de reacciones que conduce a la producción de más electrones (e), iones positivos y negativos así como

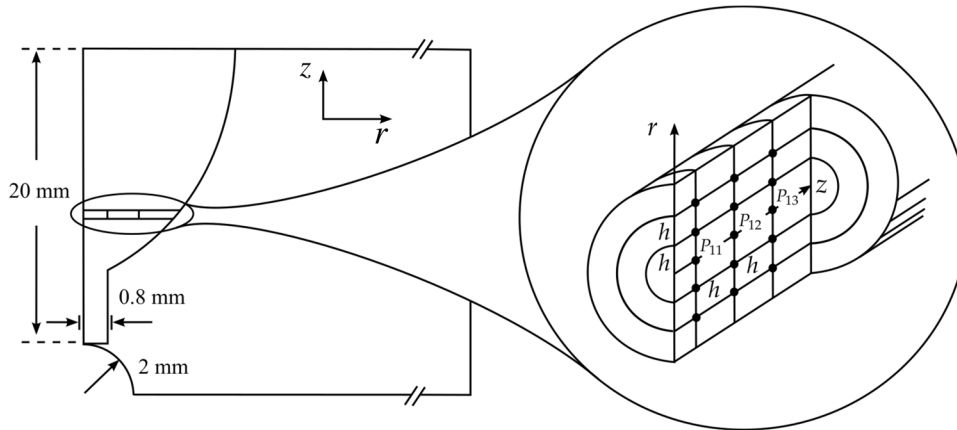


Fig. 4.3-3: Alternativa del método de los discos frente a las limitaciones a partir de cierta distancia al cátodo, donde no se satisface la condición $\Gamma_e \approx \Gamma_i$ (relación que se asume para introducir el concepto de difusión ambipolar).

especies neutras. El modelo simplificado expuesto en §4.2 analiza la cinética química de los pulsos de Trichel sobre la base de nueve especies, más el oxígeno molecular entendido como medio. De acuerdo con las simplificaciones consideradas en dicha sección, cada una de estas especies puede caracterizarse por una ecuación CDR (ec. (4.2.10)). En estas circunstancias, el sistema de ecuaciones CDR que definen el problema resulta:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} + n_e v_e \right) &= Q_e \\ \frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\partial (n_i v_i)}{\partial x} &= Q_i \quad i = O_2^+, O_4^+, \\ \frac{\partial n_j}{\partial t} + \frac{\partial (n_j v_j)}{\partial x} &= Q_j \quad j = O^-, O_2^-, O_3^-, \\ \frac{\partial n_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_k \frac{\partial n_k}{\partial x} \right) &= Q_k \quad k = O, O_2(^1\Delta_g), O_3. \end{aligned} \right\} \quad (4.3.5)$$

donde x representa la variable espacial a lo largo del eje de simetría (véase Fig. 4.3-1). Los coeficientes de transporte (μ_e, D_e) se obtuvieron a partir de BOLSIG+^{39,40}. Este programa implementa la BE en condiciones de régimen estacionario y uniformidad del campo eléctrico. Para ello utiliza una aproximación de dos términos, en la que se considera que el efecto del campo eléctrico solo introduce una pequeña anisotropía en la función de distribución de energía de los electrones (EEDF) a lo largo de la dirección de E . Aunque la solución de BE está en consonancia con la formulación del problema (§4.2), las restricciones de uniformidad y régimen estacionario

pueden fallar en presencia de fuertes gradientes, como ocurre en las proximidades de los electrodos. Para validar estos coeficientes a lo largo del desarrollo de la descarga se utilizará el criterio de Lowke y Davies⁴¹. Este criterio establece que las restricciones anteriores no tienen un impacto significativo sobre los coeficientes de transporte y tasas de reacción, siempre y cuando el campo eléctrico varíe suavemente a lo largo de una distancia de relajación (*equilibrium distance*), definida como

$$\ell_{eq,\alpha} = \frac{D_\alpha}{|\mathbf{v}_\alpha|}. \quad \langle 4.3.6 \rangle$$

En lo que respecta a los iones, dado que las movilidades de éstos varían muy poco con el campo eléctrico, se adoptan por sencillez los valores correspondientes a campos de 150 Td (véase Tabla 4.3-1)^{26,42}. En cuanto a las especies neutras (O, O₃, O₂(¹Δ_g)) se utilizan los valores recomendados por Massman⁴³, utilizando la ley de Graham para estimar el coeficiente de difusión en el caso del oxígeno atómico.

Finalmente, los términos de reacción presentes en $\langle 4.3.5 \rangle$ están descritos en el modelo químico de la Tabla 4.2-1 (véase §4.2).

Tabla 4.3-1: Movilidades reducidas para los iones en oxígeno a $E/N \sim 150$ Td (Eliasson y Kogelschatz²⁶).

Ion	μ_0 (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)
O ₂ ⁺	1.93
O ₄ ⁺	1.86
O ⁻	4.67
O ₂ ⁻	1.92
O ₃ ⁻	3.00

Nota: $\mu(p, T) = \mu_0(p_0/p)(T/T_0)$ donde $p_0 = 760$ Torr y $T_0 = 273.16$ K.

Condiciones de contorno

De acuerdo con el planteamiento descrito en §4.2, las condiciones de contorno se implementarán siguiendo el enfoque de Hagelaar et al³⁴ (ec. $\langle 4.2.16 \rangle$).

En este contexto, la emisión secundaria de electrones en el cátodo (vía impacto iónico) puede escribirse como sigue ($r_e = 1 \Rightarrow \delta_e = 0$)

$$\mu_e n_e E + D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} = \gamma (\mu_{O_2^+} n_{O_2^+} + \mu_{O_4^+} n_{O_4^+}) \quad (\text{en } x = 0), \quad \langle 4.3.7 \rangle$$

donde $\gamma = 0.01$ representa el coeficiente de emisión secundaria⁸. En este caso, por sencillez, se toma un único valor para la emisión secundaria de iones O_2^+ y O_4^+ . El proceso descrito por <4.3.7> está asociado al mecanismo de neutralización de Auger (véase §2.6), por lo que sendos iones (O_2^+ y O_4^+) se transforman en O_2 y $2O_2$, respectivamente. Por simplicidad no se considera el efecto de la emisión secundaria debida a los fotones producidos en la descarga (como en el caso estudiado en §3.6). Aunque despreciar el efecto de la fotoemisión puede ralentizar el desarrollo del primer pulso (Morrow⁸), no tiene un impacto significativo en los restantes pulsos de Trichel.

En el ánodo, considerando que el coeficiente de reflexión es nulo, esto es $\delta_e = 1$, se obtiene

$$-\mathcal{D}_e \frac{\partial n_e}{\partial x} = \frac{1}{2} v_{th,e} n_e \quad (\text{en } x = d), \quad \langle 4.3.8 \rangle$$

donde $v_{th,e}$ representa la velocidad térmica de los electrones, que es función de T_e y con ello del campo eléctrico.

En el caso de los iones, por tratarse de ecuaciones de primer orden (ec. <4.3.5>), solo se requiere una condición de contorno. Luego, teniendo en cuenta la polaridad de los electrodos, se impone que el flujo de iones negativos (positivos) sea nulo en el cátodo (ánodo), esto es,

$$\begin{aligned} n_i &= 0, & i &= O_2^+, O_4^+ & (\text{en } x = d), \\ n_j &= 0, & j &= O^-, O_2^-, O_3^- & (\text{en } x = 0). \end{aligned} \quad \langle 4.3.9 \rangle$$

Para la situación de las especies neutras se emplean los coeficientes, $\delta_{O_3} = 10^{-8}$, $\delta_O = 10^{-2}$ y $\delta_{O_2(^1\Delta_g)} = 10^{-5}$, de acuerdo con valores obtenidos de la literatura para el acero⁴⁴⁻⁴⁶. En el cátodo, se obtiene:

$$-\mathcal{D}_k \frac{\partial n_k}{\partial x} = \frac{\delta_k}{2 - \delta_k} \frac{1}{2} v_{th,k} n_k \quad (\text{en } x = 0), \quad \langle 4.3.10 \rangle$$

donde $v_{th,k}$ representa la velocidad térmica de la especie, siendo k el índice de la especie en cuestión, $k = O, O_2(^1\Delta_g), O_3$.

En el ánodo, la neutralización de los iones O^- y O_3^- produce átomos de oxígeno y moléculas de ozono. Por esta razón, la condición de contorno para el O y O_3 contempla los términos de producción correspondientes

$$-\mathcal{D}_k \frac{\partial n_k}{\partial x} = \frac{\delta_k}{2 - \delta_k} \frac{1}{2} v_{th,k} n_k + \frac{2(1 - \delta_k)}{2 - \delta_k} \mu_l E n_l \quad (\text{en } x = d), \quad \langle 4.3.11 \rangle$$

donde $k = O, O_3$ y $l = O^-, O_3^-$, respectivamente. En el caso del $O_2(^1\Delta_g)$ la condición de contorno es idéntica a la obtenida en el cátodo, dado que en ambos casos solo se contempla el proceso de desexcitación. De este modo, se tiene

$$-\mathcal{D}_k \frac{\partial n_k}{\partial x} = \frac{\delta_k}{2 - \delta_k} \frac{1}{2} v_{th,k} n_k \quad (\text{en } x = d), \quad \langle 4.3.12 \rangle$$

donde $k = \text{O}_2(^1\Delta_g)$.

Condiciones iniciales

La descarga se inicia a partir de 400 electrones distribuidos en forma de pulso gaussiano, cuyo centro está situado a $55 \mu\text{m}$ del cátodo. La concentración inicial de las restantes especies se toma igual a cero, salvo para el caso del oxígeno molecular que actúa como gas de fondo o medio. En las condiciones de problema, 50 Torr y $T = 298 \text{ K}$, la densidad del oxígeno molecular se establece en $1.62 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

4.4 Aproximación numérica

De acuerdo con los resultados obtenidos en §3.3, la discretización espacial estándar (BG) en problemas de convección dominante, con fuertes gradientes o discontinuidades, introduce inestabilidades en la solución que pueden llegar a distorsionarla por completo. Se mostró entonces que una formulación *upwind* (SUPG) relaja las condiciones de estabilidad, a costa de cierta pérdida de precisión. Así mismo, se mostró que la discretización temporal podía paliar esta pérdida de precisión a partir de un esquema de segundo orden (CN) sobre el que el término *upwind* actúa de manera localizada. Por esta razón, siguiendo los resultados mostrados en §3.6, se adopta un esquema híbrido de alta resolución (CN+SUPG), donde el término *upwind* desempeña el papel de limitador, por analogía con los esquemas de alta resolución en FD basados en limitadores (Van Leer^{47,48} y Boris-Book^{18,49}).

Como en todo esquema numérico el tamaño de la malla es crucial en el comportamiento de éste frente a posibles errores. Sin embargo, como hemos visto en §4.2, a la hora de fijar el tamaño de la malla deben contemplarse aspectos físicos y numéricos. Con relación a los primeros, la discusión seguida en §4.2 muestra que, en cualquier caso, debe ser $h \geq \lambda_D$. Por otra parte, en lo que respecta a la parte numérica, h debe definirse en previsión de los posibles efectos de los términos de reacción en aquellas regiones donde lleguen a hacerse dominantes sobre los términos de convección-difusión (véase §3.6 para una discusión detallada). En este sentido, las reacciones estudiadas en el ejemplo §3.6 sirven como indicador de los valores extremos del número de Damköhler (Da) para el problema de los pulsos de Trichel, ya que representan las reacciones dominantes en la evolución de los pulsos. Por este motivo, de acuerdo con los dos puntos anteriormente mencionados

$$h \sim \lambda_D \sim \mu\text{m} \Rightarrow \text{Da} < 1. \quad (4.4.1)$$

Con este criterio en mente, se discretiza el problema de transporte (1D) usando 1500 nodos que se distribuyen a lo largo del eje de simetría en dos partes bien diferenciadas. La primera de éstas contiene 1000 nodos y se extiende desde la superficie del cátodo ($x_0 = 0$) a la coordenada $x_{1000} = 4 \text{ mm}$. En esta primera parte la distancia entre nodos sucesivos, $h_k = x_{k+1} - x_k$, se define a partir de una progresión geométrica $h_k = 2^{1/999} h_{k-1}$, donde $h_0 \approx 2.77 \mu\text{m}$. El segundo intervalo está formado por 500 nodos que completan el resto del dominio, esto es, $x_{1500} = 20 \text{ mm}$. En esta región la distancia entre nodos está definida por una progresión aritmética, $h_k = h_{k-1} + 2.62 \times 10^{-8} \text{ m}$, donde $h_{1000} \approx 2.90 \mu\text{m}$.

El cálculo del potencial eléctrico (2D) combina una malla estructurada a lo largo del canal de la descarga y una malla no estructurada compuesta de elementos triangulares con avance frontal para el resto del dominio (véase Fig. 4.4-1). La primera de éstas representa el canal de la descarga donde se interpolan los resultados del problema de transporte 1D. Para ello se definen dos partes: la primera de ellas consta de 500 nodos uniformemente distribuidos en el rango $0 \leq z \leq 2 \text{ mm}$. Para el resto del canal se utiliza una progresión aritmética $h_k = h_{k-1} + 4.73 \times 10^{-7} \text{ m}$, donde $h_{500} \approx 13.1 \mu\text{m}$. Finalmente, para la distribución radial de la malla estructurada que define el canal se utilizan 25 nodos uniformemente distribuidos ($0 \leq r \leq 0.8 \text{ mm}$).

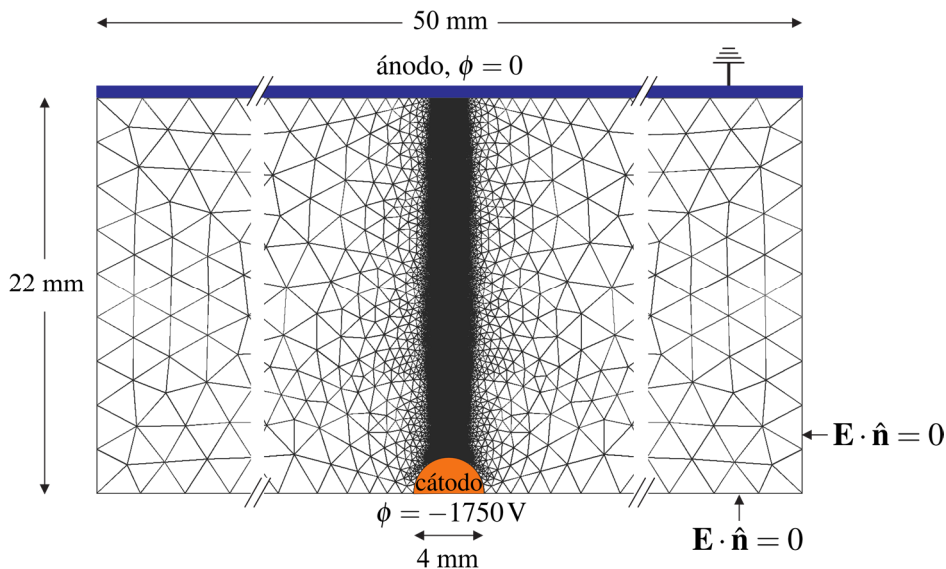


Fig. 4.4-1: Mallado del dominio 2D, donde se aprecia la malla no estructurada utilizada para la región fuera del canal de la descarga. Para este último se utiliza una malla estructurada que interpola los resultados del problema de transporte (1D).

4.5 Evolución de los pulsos de Trichel

La Fig. 4.5-1 muestra el carácter pulsado de la intensidad de corriente, calculada a partir de la ecuación de Sato⁸, cuando el cátodo está sujeto a una tensión aplicada de -1750 V. Como puede verse en esta figura, la amplitud del primer pulso es mucho mayor que para el tren de pulsos posterior, ya que éste se desarrolla en una región libre de carga. A diferencia de los modelos clásicos, donde las especies cargadas se agrupan en iones generalizados, el presente modelo de múltiples especies nos permitirá estudiar la interacción entre las distintas especies (cargadas y neutras), y cuál es papel de cada una de ellas en las diferentes escalas, espacial y temporal, en las que se desarrollan los pulsos.

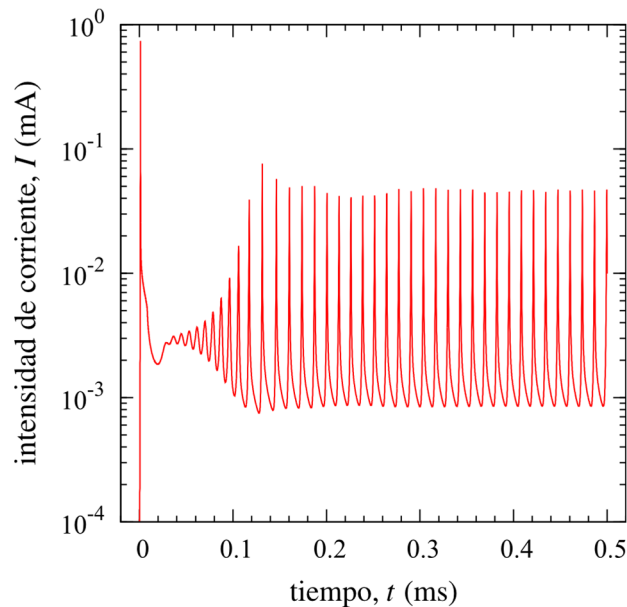


Fig. 4.5-1: Intensidad de corriente como función del tiempo para los primeros $500 \mu\text{s}$, cuando se aplica un voltaje de -1750 V.

El primer pulso de Trichel

La estructura del primer pulso de Trichel puede apreciarse en detalle en la Fig. 4.5-2. El recuadro interior muestra el mismo pulso en escala lineal y revela la presencia de un “escalón” en el flanco de subida del primer pulso. Los experimentos llevados a cabo por Cross et al^{5º} constatan la existencia de este salto o escalón cuando se utilizan puntas de radio 1 mm en oxígeno a baja presión. Para analizar la evolución temporal del campo eléctrico, las densidades de las diferentes especies y las tasas reacción, se divide su desarrollo en tres fases temporales: la fase de crecimiento bajo campo

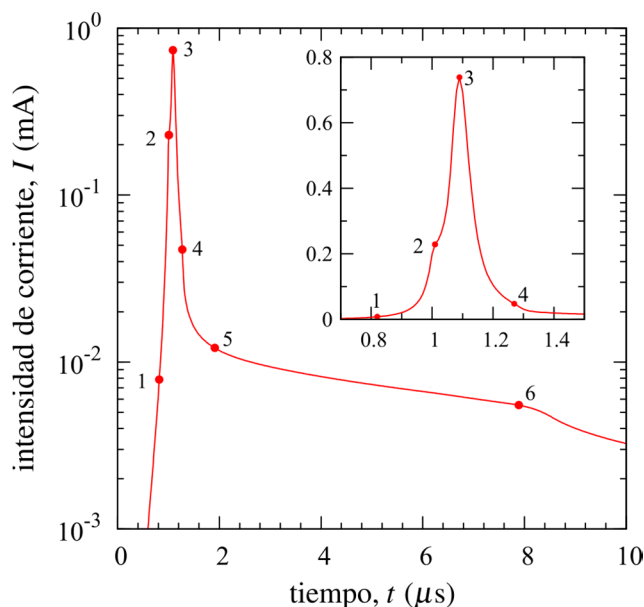


Fig. 4.5-2: Intensidad de corriente como función del tiempo para el primer pulso de Trichel mostrado en la Fig. 4.5-1. El recuadro muestra este mismo pulso representado en escala lineal. Los puntos en la curva se corresponden con los tiempos: (1) $0.82 \mu\text{s}$, (2) $1.01 \mu\text{s}$, (3) $1.09 \mu\text{s}$, (4) $1.27 \mu\text{s}$, (5) $1.91 \mu\text{s}$ y (6) $7.89 \mu\text{s}$.

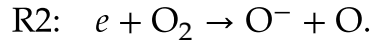
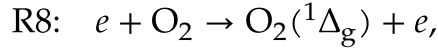
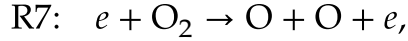
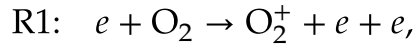
Laplaciano, la fase de colapso del campo eléctrico y la fase de barrido de la carga acumulada. Algunos de los tiempos característicos que delimitan cada una de estas fases pueden apreciarse en la Fig. 4.5-2 y se retomaran en la discusión que sigue.

Fase de crecimiento bajo campo Laplaciano

Como se ha indicado previamente, el primer pulso se desarrolla en una región inicialmente libre de carga. Por esta razón, el campo eléctrico que actúa sobre las partículas se corresponde con el Laplaciano. Esta situación se extiende centenares de nanosegundos hasta que la carga espacial crece lo suficiente para empezar a distorsionar el campo eléctrico. El instante $0.082 \mu\text{s}$ es representativo de esta fase inicial, con un valor de corriente en torno a los $8 \mu\text{A}$, dos órdenes de magnitud inferior al valor de corriente asociado al máximo del pico. En la Fig. 4.5-3 se muestra la distribución espacial del campo eléctrico (Fig. 4.5-3-(a)-(c)) y de las especies cargadas (Fig. 4.5-3-(d)-(f)) durante la etapa de crecimiento del primer pulso, y se ha incluido este instante entre los tiempos seleccionados.

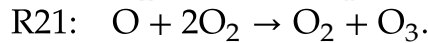
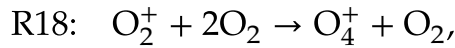
Durante esta fase inicial, las reacciones dominantes son la ionización (R1), la disociación del oxígeno por impacto electrónico (R7), la excitación

de moléculas de oxígeno (R8) y la captura disociativa (R2):



En la Fig. 4.5-3-(a)-(c), la línea roja punteada corresponde al valor del campo eléctrico para el cual ionización y captura electrónica se igualan, $E^* \sim 2.2 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$. Por tanto, este valor supone un punto representativo para el campo eléctrico a partir del cual se activa una parte importante de la cinética química de la descarga. La Fig. 4.5-3-(d) muestra la distribución espacial de electrones, O₂⁺ y O⁻, generados por medio de estas reacciones, mientras que en la Fig. 4.5-3-(g) se representa la distribución espacial para las especies neutras O y O₂(¹Δ_g).

Los iones O₂⁺ y los átomos de oxígeno (O) pueden combinarse con moléculas de oxígeno formando O₄⁺ y ozono, respectivamente:



La reacción R18 es particularmente activa en aquellas regiones donde la densidad electrónica es pequeña. Esta situación se produce en las proximidades del cátodo, donde a pesar de superarse el umbral de ionización, el ion positivo dominante es el O₄⁺. En esta región, los iones O₂⁺ derivados de la ionización de las moléculas de oxígeno son rápidamente transformados en O₄⁺ (véase Fig. 4.5-3-(d)). En cuanto a las especies neutras, la constante de reacción responsable de la formación de ozono (R21), a diferencia de la relacionada con la formación de oxígeno atómico (R7), no depende del campo eléctrico. Es por esto que la concentración de ozono es relativamente baja, en comparación con el oxígeno atómico durante esta fase inicial.

Otras reacciones relevantes en esta primera fase, aunque con un papel secundario, son la transferencia de carga entre O⁻ y O₂⁻ (R14), o la emisión asociativa de electrones a partir de O⁻ (R12) y el *clustering* de O⁻ con O₂ (R17).

Fase de colapso del campo eléctrico

Con el transcurso del tiempo, la acumulación de carga positiva en las proximidades del cátodo llega a ser suficientemente importante como para distorsionar el campo eléctrico. Esto algo que puede verse en la Fig. 4.5-3-(b), donde el efecto de la carga positiva cerca del cátodo refuerza el campo eléctrico en la superficie electrodo y, al mismo tiempo, contribuye al

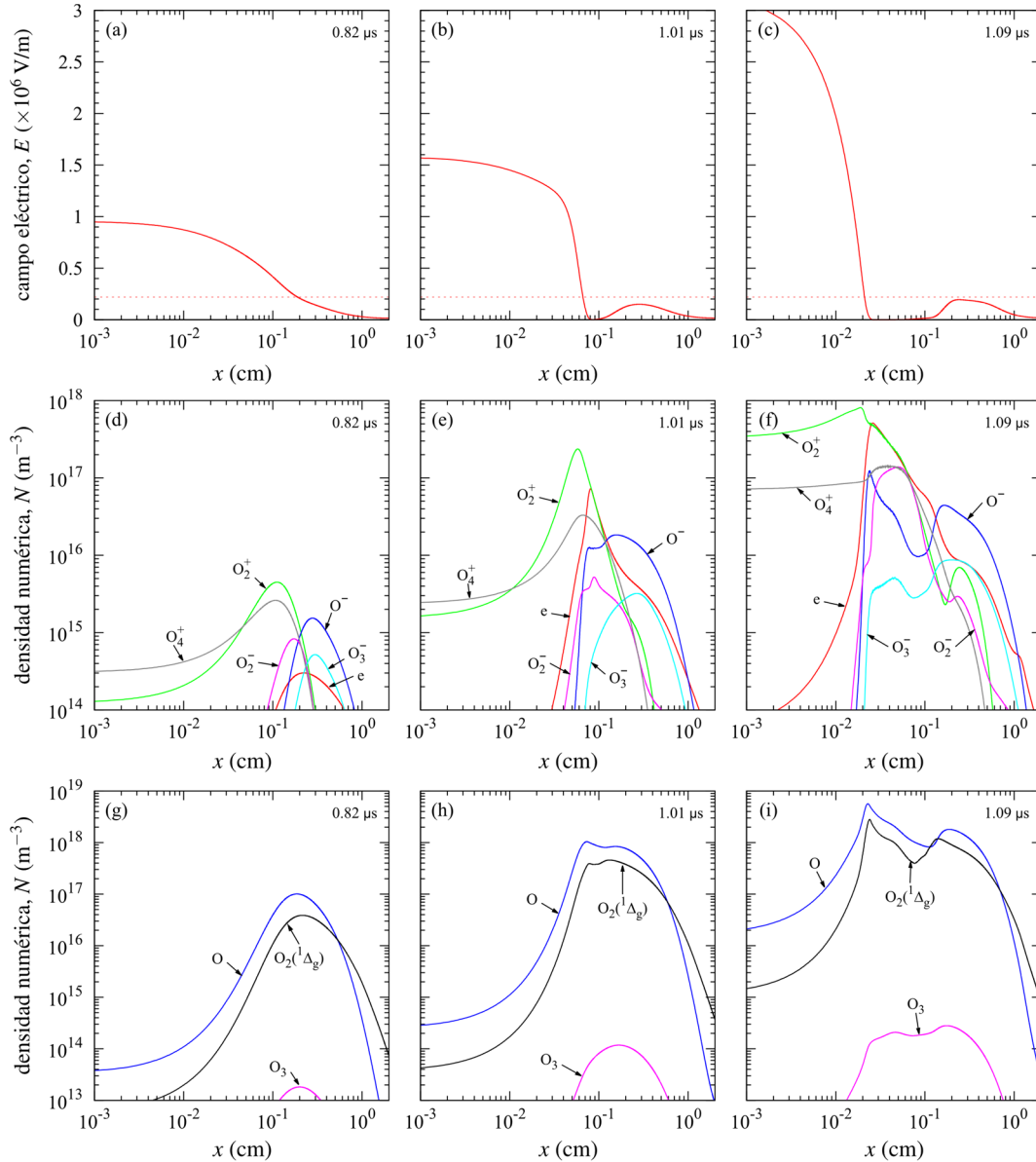
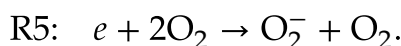


Fig. 4.5-3: Distribución espacial del campo eléctrico (a)-(c), especies cargadas (d)-(f) y especies neutras (g)-(i) para los puntos (1), (2) y (3) de Fig. 4.5-2. El primer instante ($0.82 \mu\text{s}$) es representativo de la fase de crecimiento en campo Laplaciano. Los dos instantes siguientes ($1.01 \mu\text{s}$ y $1.09 \mu\text{s}$) muestran la evolución de la fase del colapso del campo eléctrico.

desarrollo de una región de colapso del campo ($E \approx 0$) en torno a $x = 0.1 \text{ cm}$. Este proceso se acentúa en instantes posteriores, cuando la intensidad de corriente alcanza su valor máximo, a $1.09 \mu\text{s}$ (véase Fig. 4.5-2). En este instante el valor del campo eléctrico en la superficie del cátodo alcanza su

valor máximo (véase Fig. 4.5-3-(c)), y la región de colapso del campo eléctrico se extiende desde 2×10^{-2} cm a 10^{-1} cm, aproximadamente. Por el contrario, la región de ionización sufre un proceso de contracción en la evolución hacia este valor máximo del campo eléctrico en la superficie del cátodo.

La distribución espacial del campo eléctrico tiene una influencia crucial en aquellas reacciones y especies que son predominantes en las diferentes fases durante la evolución del pulso. En este sentido, en las proximidades del cátodo, el refuerzo del campo eléctrico incentiva la ionización (R1), la disociación de oxígeno (R7), así como la excitación de oxígeno O₂(¹Δ_g) vía R8. Esto es algo que se aprecia en la Fig. 4.5-3-(e),(f) y (h),(i), donde las densidades de O₂⁺, O y O₂(¹Δ_g) aumentan varios ordenes de magnitud respecto a la fase previa. Por otra parte, en la región de colapso del campo, se favorece la formación de iones negativos por medio de la captura disociativa:



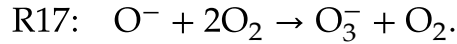
Este resultado está en consonancia con los datos mostrados en la Fig. 4.2-2, donde se observa que la eficacia del proceso de captura de tres cuerpos predomina sobre la de dos cuerpos, a campos bajos. Por este motivo, O₂⁻ es el ion negativo predominante en dicha región (Fig. 4.5-3-(f)). Además, también es ésta la causa por la que el desarrollo de esta zona ($E \approx 0$) tiene un impacto significativo en la producción de oxígeno atómico vía R7 (véase Fig. 4.2-2), el cual se reduce drásticamente en esta región.

Cerca del ánodo también se produce un refuerzo local del campo eléctrico en la región $0.2 \text{ cm} \lesssim x \lesssim 0.5 \text{ cm}$, debido a la acumulación de iones negativos (Fig. 4.5-3-(b) y (c)). Aunque el efecto del refuerzo del campo eléctrico en esta región es mucho menor que en el cátodo, su valor es suficiente para estimular aquellas reacciones que se activan con el campo eléctrico, tales como la disociación y excitación de moléculas de oxígeno (R7), (R8), la ionización (R1) y la captura disociativa (R2). Por tanto, en esta región, los iones negativos O⁻ vuelven a ser dominantes (Fig. 4.5-3-(e) y (f)) junto con el oxígeno atómico y el estado excitado del oxígeno molecular, O₂(¹Δ_g), que aumentan significativamente su densidad (Fig. 4.5-3-(h) e (i)).

Fase de barrido de la carga espacial

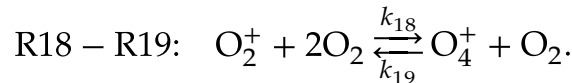
Una vez alcanzado el valor máximo para la intensidad de corriente, a $1.09 \mu\text{s}$, la contracción progresiva de la región de ionización termina por limitar la producción de electrones, y con ello el crecimiento de la corriente. De este modo, la intensidad total de corriente empieza a decaer (Fig. 4.5-2) y la carga espacial acumulada durante las fases previas empieza a ser eliminada progresivamente.

Durante esta fase, la capacidad de ionización en las inmediaciones del cátodo disminuye de forma continuada, lo que se traduce en valores despreciables para densidad de electrones (Fig. 4.5-4-(d)-(f)). Una situación completamente análoga tiene lugar para la disociación de moléculas de oxígeno vía impacto electrónico (R7). La captura electrónica disociativa (R2), constituye el principal sumidero de electrones, aunque los iones O^- formados como resultado de ello son rápidamente convertidos a O_3^- vía R17



Esta reacción se hace especialmente importante durante la primera etapa de esta fase, prueba de ello es el predominio de los iones negativos O_2^- y O_3^- , y la extinción progresiva del ion O^- (Fig. 4.5-4-(d)-(f))

La asociación de iones O_2^+ con moléculas de oxígeno para formar O_4^+ gana importancia con respecto a la ionización y, en consecuencia, el ion O_4^+ llega a ser el ion positivo dominante durante esta fase. Además, siempre que $E \ll E^*$, el proceso de ionización será despreciable, lo que favorece el equilibrio entre las reacciones de formación (R18) y disociación (R19) del O_4^+



La razón entre la densidad de O_4^+ y O_2^+ se puede estimar a partir de la constante de equilibrio, $N_{O_4^+}/N_{O_2^+} \approx k_{18}N_{O_2}/k_{19} \approx 22.4$ (Fig. 4.5-4-(e) y (f)).

La disminución progresiva de la carga espacial positiva reduce el campo eléctrico en las proximidades del cátodo, lo que simultáneamente conduce al inicio de una fase de recuperación del campo en la región previamente colapsada. Esto significa que la carga negativa acumulada en la región de colapso del campo empieza a ser evacuada conforme el campo eléctrico va recuperándose. No obstante, esta recuperación no ocurre de forma homogénea (Fig. 4.5-4-(a)-(c)), lo que favorece la aparición de fuertes gradientes en las densidades de los iones donde $d|E|/dx < 0$. Este efecto puede observarse en los frentes de choque que se desarrollan en las densidades del O_2^- y O_3^- (Fig. 4.5-4-(f)). Así, como consecuencia del carácter heterogéneo de la recuperación del campo eléctrico se induce una distribución espacial segregada para estas especies.

En lo que respecta a las especies neutras, la densidad del oxígeno atómico y del estado excitado del oxígeno molecular ($O_2(^1\Delta_g)$) permanecen prácticamente inalterables durante esta fase. (Fig. 4.5-4-(g)-(i)), excepto en una estrecha región próxima al cátodo, donde el campo eléctrico es suficientemente intenso como para producir la disociación y excitación de moléculas del oxígeno por impacto electrónico. Por el contrario, la dinámica

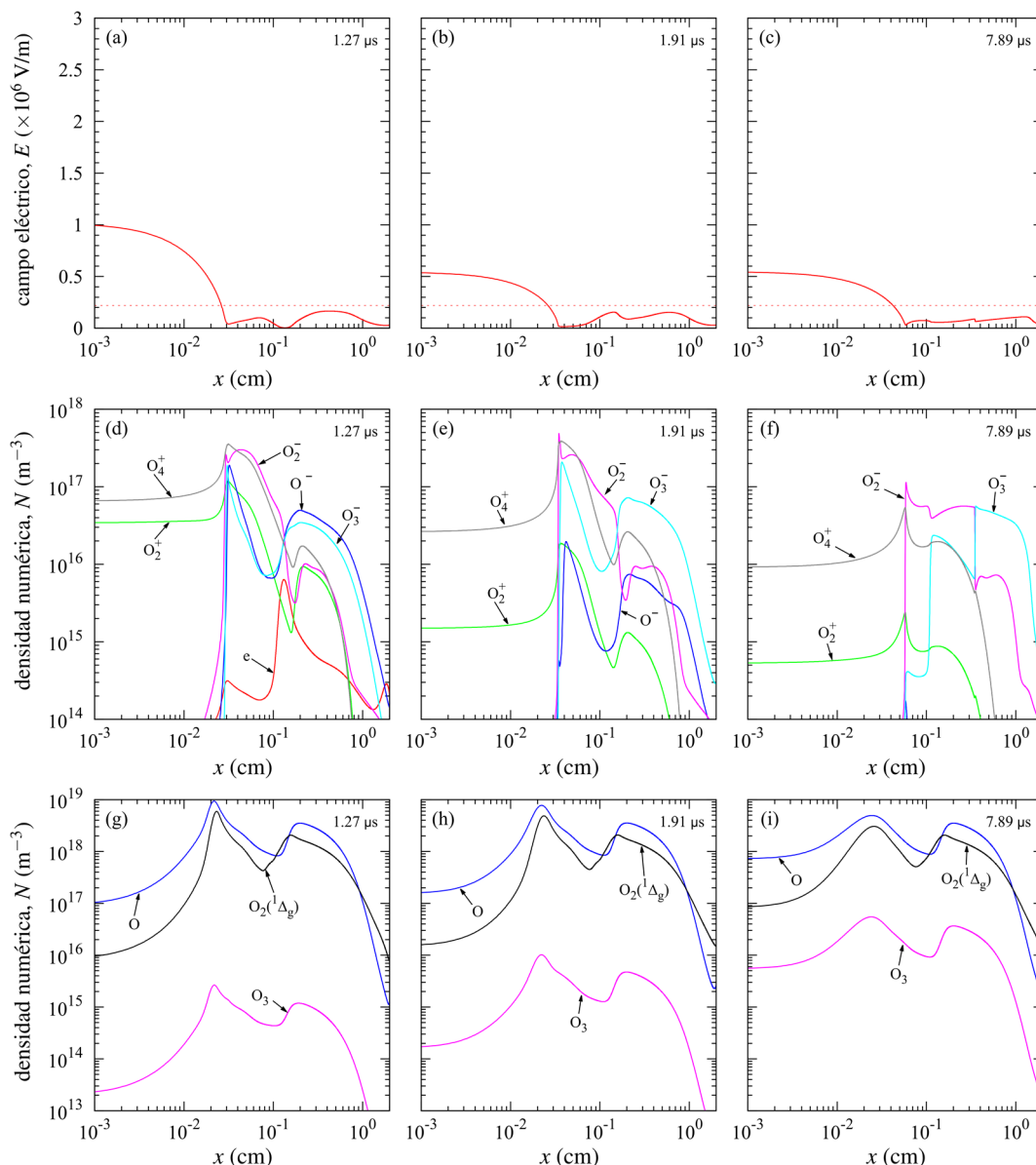


Fig. 4.5-4: Distribución espacial del campo eléctrico (a)-(c), especies cargadas (d)-(f) y especies neutras (g)-(i) para los puntos (4), (5) y (6) de Fig. 4.5-2.

del ozono no se ve afectada significativamente en esta fase, dado que la cantidad de oxígeno atómico acumulada es suficientemente elevada y la constante de reacción para la formación de ozono es independiente del campo eléctrico. Por este motivo la concentración de ozono experimenta un crecimiento constante en el transcurso de esta fase en todo el dominio (Fig. 4.5-4-(g)-(i)).

Por último, en la Fig. 4.5-5 se muestra la distribución de la densidad de

carga neta durante el transcurso del primer pulso de Trichel. El recuadro interior de la Fig. 4.5-5 representa una imagen detallada de la distribución de carga para $t = 7.89 \mu\text{s}$. El pico que aparece en torno a $x = 0.3 \text{ cm}$ no es un artificio numérico que afecte a esa región de la malla. Esto es algo que puede apreciarse en el propio recuadro, donde se ha representado con mayor resolución dicho pico en el intervalo $[0.34, 0.36] \text{ cm}$. De hecho el origen físico de este pico está directamente relacionado con la mayor movilidad del O_3^- respecto del O_2^- ($\mu_0 \approx 3 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ para el O_3 , y $\mu_0 \approx 1.92 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ para el O_2^-), que tiende a separar la distribución espacialmente segregada de estas dos especies. Este pico no aparece cuando se emplea una movilidad común para todos los iones negativos.

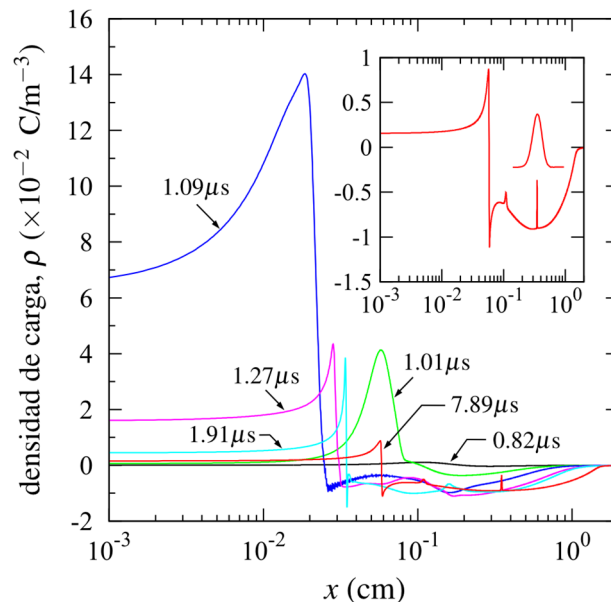


Fig. 4.5-5: Evolución de la distribución espacial de carga neta en el transcurso del primer pulso de Trichel. El recuadro interior se corresponde con el instante $7.89 \mu\text{s}$.

Pulsos de Trichel regulares

Las características peculiares del primer pulso de Trichel responden a la particularidad de que éste se desarrolla en una región libre de carga. Una vez que este primer pulso se extingue, se establece un régimen pulsado regular cuya evolución está modulada por la carga negativa producida en los pulsos previos, ya que una parte de esta carga permanece en la región de la descarga. En la Fig. 4.5-6 se ha representado uno de los pulsos de Trichel regulares en escalas logarítmica y lineal. Aunque la forma, amplitud y duración de estos pulsos regulares son muy similares, difieren notablemente del primer pulso. Por ejemplo, la amplitud se ve reducida en más de un orden de magnitud

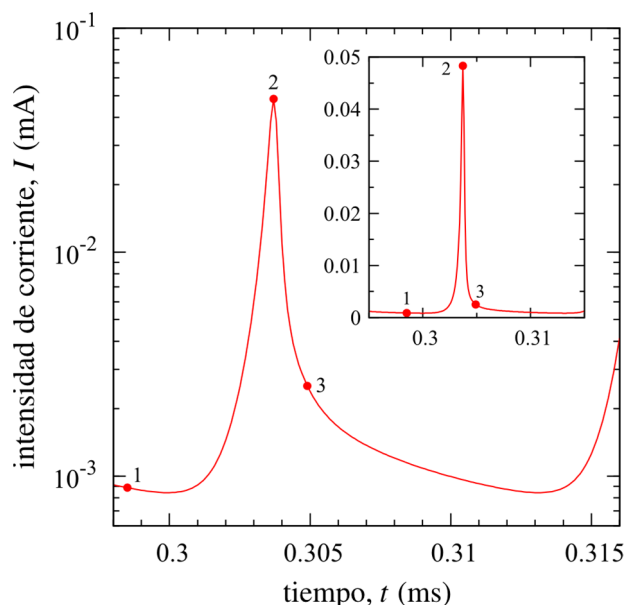


Fig. 4.5-6: Intensidad de corriente como función del tiempo para uno de los pulsos de Trichel mostrados en Fig. 4.5-1. El recuadro interior muestra el mismo pulso utilizando una escala lineal. Los puntos representados en la curva se corresponden con los instantes: (1) $298.5 \mu\text{s}$, (2) $303.7 \mu\text{s}$ y (3) $304.9 \mu\text{s}$.

($I_{\text{máx}} \approx 48.7 \mu\text{A}$), mientras que la duración del pulso, medida a partir de los puntos situados a la mitad del máximo, experimenta un factor de amplificación de aproximadamente $\times 5$ ($\Delta t_{\text{FDHM}} \sim 0.5 \mu\text{s}$).

El campo eléctrico así como la densidad de las especies cargadas se muestran en la Fig. 4.5-7 para los instantes indicados en la Fig. 4.5-6. El primero de los instantes considerados, $t = 298.5 \mu\text{s}$, representa la fase previa a la formación de un nuevo pulso. Durante esta fase precursora, se observa que la densidad de carga está formada esencialmente por el ion O_3^- y, en menor medida, por el ion O_2^- (Fig. 4.5-7-(d)). Este último ion es dominante exclusivamente en una región interior, en torno a $x \approx 0.2 \text{ cm}$. En ambas densidades pueden apreciarse oscilaciones que reflejan la producción de éstas en el transcurso de los pulsos precedentes. A partir del número de estas oscilaciones puede estimarse que el tiempo requerido por el campo eléctrico para barrer toda la carga negativa es, aproximadamente, nueve veces el tiempo entre pulsos, esto es, $\Delta t_{\text{barrido}} \approx 9 \times 12.7 \mu\text{s} \approx 114 \mu\text{s}$. En lo que respecta a los iones positivos, la densidad de O_4^+ es, al menos, dos órdenes de magnitud inferior a la de iones negativos, y en el caso de los electrones es incluso inferior. La actividad química predominante durante esta fase es la formación de ozono a costa del oxígeno atómico (R21).

Conforme se barre la carga negativa a través del ánodo se produce la

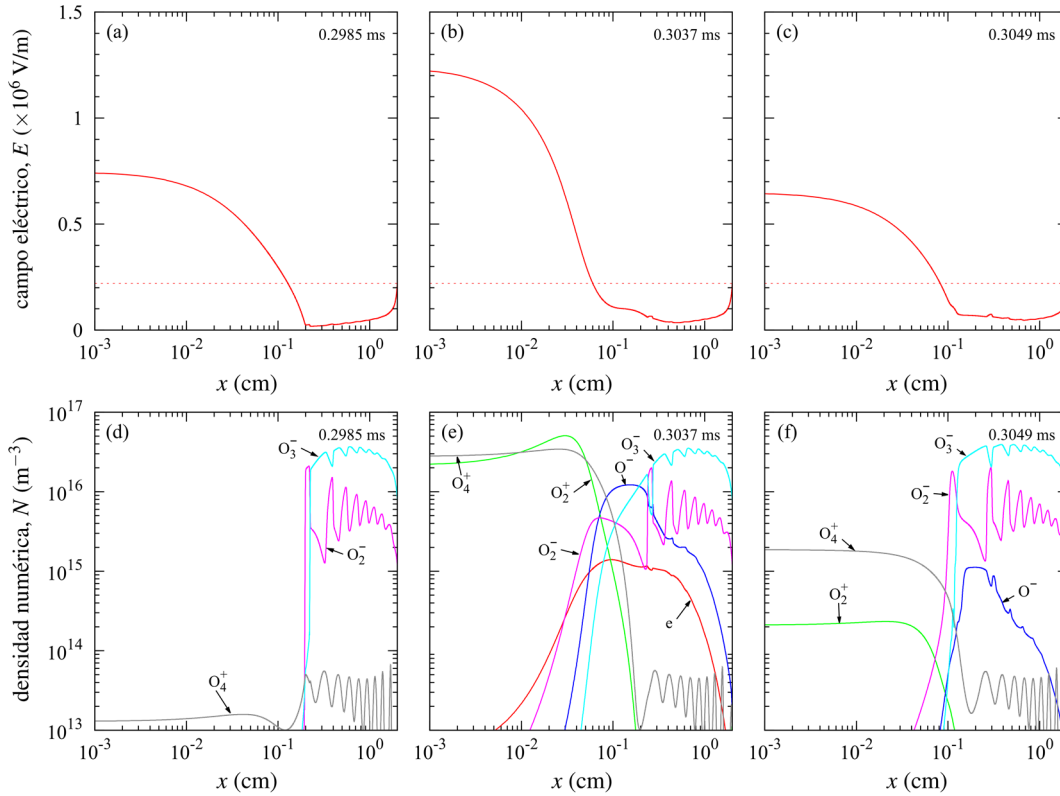


Fig. 4.5-7: Distribución espacial del campo eléctrico (a)-(c) y especies cargadas (d)-(f) para los puntos (1), (2) y (3) de Fig. 4.5-6.

recuperación del campo eléctrico en las proximidades del cátodo. Con ello se favorecen las reacciones inducidas por impacto electrónico con las moléculas de oxígeno, tales como la ionización (R1), disociación (R7), excitación (R8) y captura disociativa (R2). Estos procesos intensifican la producción de electrones, O^- y O_2^+ , este último convirtiéndose parcialmente en O_4^+ vía R18. De este modo, la acumulación progresiva de carga positiva en las proximidades del cátodo va reforzando el campo, lo que estimula, más aún, los procesos anteriormente citados. Como resultado de ello, se aprecia un incremento significativo de las especies durante esta fase (Fig. 4.5-7-(e)), alcanzándose un máximo de corriente en $t = 303.7 \mu s$.

El crecimiento del ion O^- activa las reacciones de asociación de este ion con las moléculas de oxígeno para formar O_2^- (R14) y O_3^- (R17). Como ya se mencionado en la discusión del primer pulso de Trichel, la constante de reacción para la formación del O_2^- (R14) aumenta con el campo eléctrico, mientras que la constante de reacción asociada a la formación de O_3^- es independiente del campo eléctrico. Razón por la cual la generación máxima de O_2^- está vinculada a una región más cercana al cátodo, en comparación con el caso del O_3^- .

Por otra parte, la acumulación de carga negativa cerca del ánodo (el electrodo plano) refuerza el campo eléctrico en su superficie. Como puede verse en la Fig. 4.5-7-(a)-(c), el campo eléctrico en la superficie del ánodo permanece prácticamente constante en el tiempo. No obstante, su valor es lo suficientemente elevado como para producir la ionización de las moléculas de oxígeno, siempre y cuando haya una concentración mínima de electrones semilla. Estos electrones semilla son producidos durante la fase en la que la corriente alcanza su valor máximo, cuando hay un aumento significativo en la densidad de éstos en el volumen de la descarga. En ese instante, los iones positivos son producidos cerca del ánodo y, posteriormente, son inyectados hacia el cátodo. Si bien, dado que la ionización está confinada a una estrecha región cerca del ánodo, los iones O_2^+ se convierten rápidamente a O_4^+ tan pronto se alejan de la superficie del electrodo. Como resultado de ello, se alcanza un equilibrio entre estos iones que está regulado por las reacciones R18-R19.

Con el transcurso del tiempo, el crecimiento de la carga espacial negativa a lo largo del pico de corriente distorsiona el campo eléctrico en la región cercana al cátodo, reduciendo su valor (Fig. 4.5-7-(c)). Consecuentemente, la ionización decae y los electrones se capturan progresivamente vía R2, produciendo O^- . Estos últimos se convierten principalmente en O_3^- por medio de la asociación con moléculas de oxígeno (R17). Como se muestra en la Fig. 4.5-7-(f), las densidades de O_2^+ y O^- se reducen progresivamente y, finalmente, la carga espacial queda formada exclusivamente por O_2^- y O_3^- , como en la situación previa al desarrollo del pulso.

A diferencia de lo que ocurre con las especies cargadas, los átomos de oxígeno, las moléculas de ozono y los estados excitados del oxígeno molecular

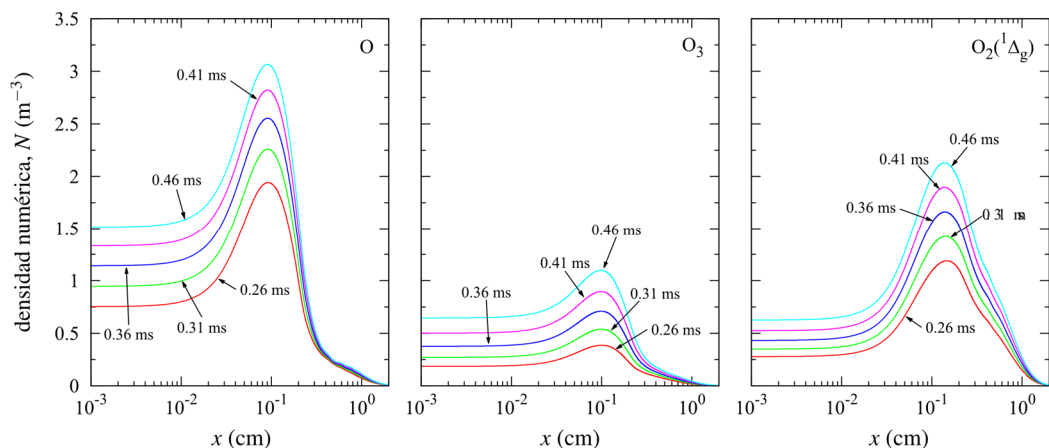


Fig. 4.5-8: Distribución espacial de átomos de oxígeno (izquierda), ozono (centro) y $O_2(^1\Delta_g)$ en diferentes instantes del régimen de pulsos de Trichel.

($O_2(^1\Delta_g)$) evolucionan muy poco en el transcurso de un pulso de Trichel. Esto es así, debido a que la producción de estas especies neutras en un pulso regular es relativamente pequeña en comparación con las densidades ya acumuladas, en el volumen de la descarga. Por tanto, se requiere un periodo de tiempo mayor para observar cambios significativos en estas especies. En la Fig. 4.5-8 se ha representado la evolución de estas especies en el régimen de los pulsos de Trichel regulares, mostrando su distribución espacial para los tiempos comprendidos en el intervalo (0.26,0.46) ms.

La Fig. 4.5-9 muestra la evolución temporal de la densidad de carga neta en el transcurso del pulso regular analizado en la Fig. 4.5-6. Como puede apreciarse, la carga espacial es negativa antes de que se desarrolle el pulso, siendo prácticamente nula en las cercanías del cátodo. Con cada pulso, la densidad de carga negativa progresa hacia el cátodo, alterando con ello el campo eléctrico en el electrodo, por lo que esta carga debe ser eliminada antes de que el siguiente pulso pueda iniciarse. De un modo similar a como ocurría en el primer pulso de Trichel, la diferencia de movilidades entre los iones O_2^- y O_3^- , junto con la segregación espacial de estas especies, originan la formación de picos en la densidad de carga debido a la separación de los perfiles de densidad de estas dos especies.

En la Fig. 4.5-10 se muestra el promedio espacial de las especies iónicas en función del tiempo. Tal y como ilustra esta figura, los iones O_2^- y O_3^- son los únicos que tiene una presencia significativa en cualquier instante del

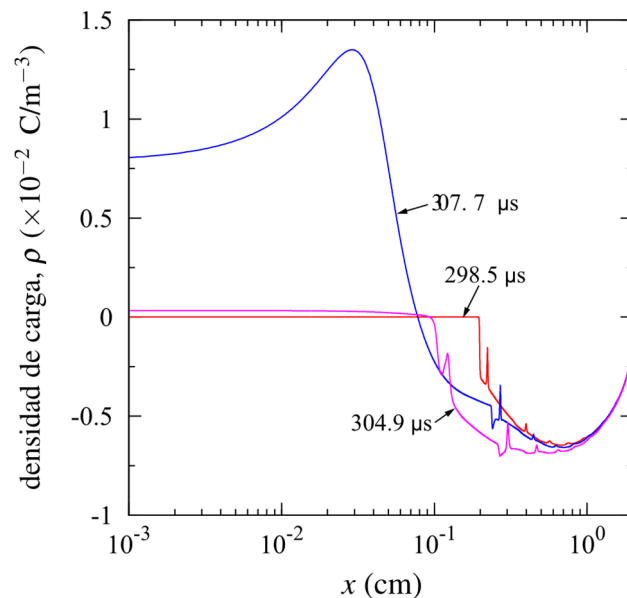


Fig. 4.5-9: Distribución espacial de la densidad de carga neta para los instantes analizados en el pulso regular de Trichel en Fig. 4.5-6.

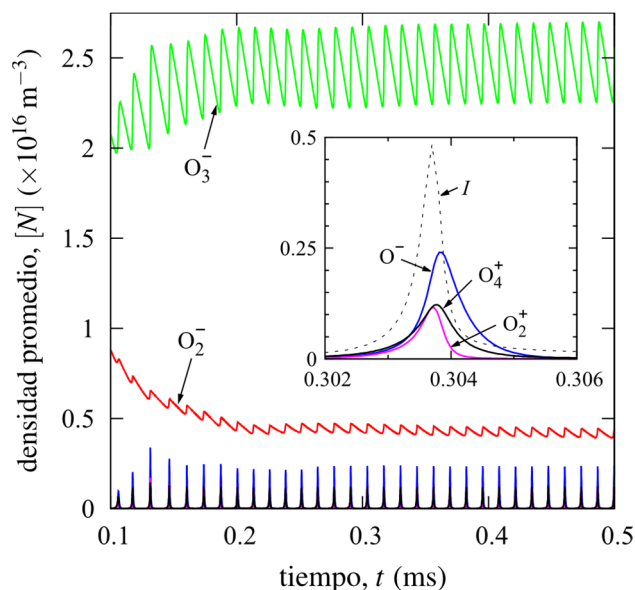


Fig. 4.5-10: Promedio espacial de las diferentes especies iónicas como función del tiempo. El recuadro muestra el intervalo correspondiente a un único pulso de Trichel. En este recuadro también se representa la intensidad de corriente en unidades arbitrarias.

intervalo de tiempo considerado. Esto es así dado que la vida de los iones O^- , O_2^+ y O_4^+ está esencialmente limitada a la duración del pulso, como se ha visto anteriormente. Las densidades de los iones O_2^- y O_3^- experimentan un incremento a lo largo del desarrollo del pulso, aunque posteriormente estas densidades disminuyen conforme los iones se acercan al ánodo donde son neutralizados. En el recuadro interior de la Fig. 4.5-10 se muestra el detalle de la evolución de estos promedios (O^- , O_2^+ y O_4^+) en el transcurso de un único pulso de Trichel, cuya intensidad de corriente también se representa en trazo discontinuo. Se observa que el ion O_2^+ está en fase con el pulso de corriente, mientras que para el resto de promedios se aprecia un desfase del orden de una fracción de microsegundos.

Las densidades promediadas de O y $O_2(^1\Delta_g)$ exhiben un aumento neto sostenido en el tiempo, si bien su crecimiento tiene un comportamiento tipo “dientes de sierra” (Fig. 4.5-11). Este efecto tiene su origen en los procesos de formación correspondientes, R7 y R8, dado que requieren la existencia de electrones, cuya presencia solo es significativa durante el pico de corriente. No ocurre así con el ozono, cuyo proceso de formación depende del *clustering* entre átomos y moléculas de oxígeno (R21). Por este motivo el crecimiento de la densidad promediada de ozono es constante en el tiempo, a costa de la reserva existente de átomos de oxígeno.

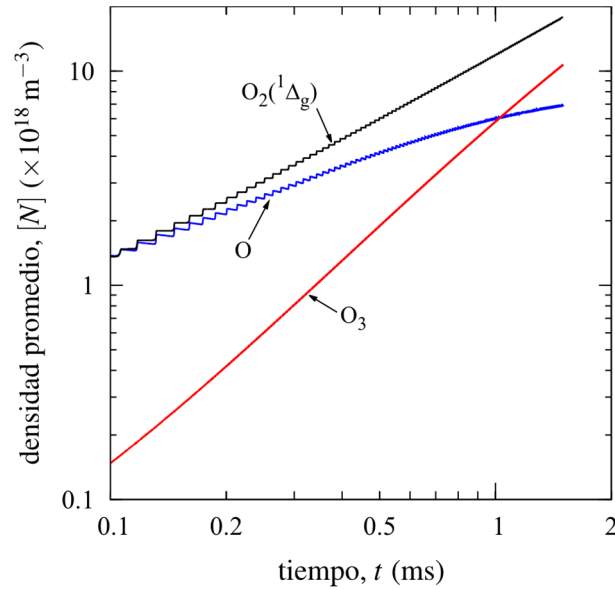


Fig. 4.5-11: Promedio espacial para la densidad de oxígeno atómico, ozono y $\text{O}_2(^1\Delta_g)$.

Durante los primeros pulsos, la producción de oxígeno atómico (R7) supera la recombinación de éste con el oxígeno molecular para la formación de ozono (R21). Como resultado de ello, el promedio de oxígeno atómico aumenta linealmente en el tiempo. Sin embargo, pasados estos primeros pulsos, la tasa de recombinación va ganando importancia debido a su proporcionalidad con la densidad de oxígeno atómico, $k_{21}N_{\text{O}}N_{\text{O}_2}^2$. Esta es la causa por la que el aumento del oxígeno atómico se va ralentizando, y su densidad tiende hacia un valor de equilibrio, que se alcanzará cuando la recombinación entre dos pulsos sucesivos iguale a la producción de oxígeno atómico en el transcurso de un único pulso, $\langle k_{21}N_{\text{O}} \rangle N_{\text{O}_2}^2 \approx \langle k_7 N_e \rangle N_{\text{O}_2}$, donde $\langle \rangle$ representa un promedio espacio-temporal; espacial sobre el volumen de la descarga y temporal entre dos pulsos consecutivos. De acuerdo con los resultados presentados en la Fig. 4.5-11, la densidad de saturación es aproximadamente $\langle N_{\text{O}} \rangle_{\text{sat}} \sim 8 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$.

Análogamente, el estado excitado del oxígeno molecular, $\text{O}_2(^1\Delta_g)$, aumenta linealmente en el tiempo, aunque este crecimiento se verá finalmente limitado cuando su eliminación a través de las reacciones R23 y/o R24 se haga comparable a la producción de esta especie vía R8. No obstante, esta limitación no llega a observarse en la Fig. 4.5-11 dado que la densidad de $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ es aún muy pequeña y, por tanto, la contribución de los términos sumidero es despreciable en el intervalo de tiempo analizado. A partir de la Fig. 4.5-11 puede estimarse la tasa de producción de moléculas de oxígeno excitado en torno a $1.2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Esto significa que durante un pulso

de Trichel, cuya duración aproximada son 13 μs , la densidad de estados excitados generados en el desarrollo de un único pulso es de $1.6 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$.

En cuanto al ozono, su evolución en el tiempo está regulada por el oxígeno atómico acumulado en el volumen de la descarga. Como se ha comentado anteriormente, las pérdidas de ozono por medio de la recombinación con las moléculas de oxígeno (R22) y con el estado excitado del oxígeno (R24) son despreciables a lo largo del intervalo simulado. En este sentido, la tasa a la que varía la densidad de ozono viene dada esencialmente por R21, esto es, $d\langle N_{\text{O}_3} \rangle / dt \approx \langle k_{13} N_{\text{O}} \rangle N_{\text{O}_2}^2$. Como puede verse en la Fig. 4.5-11, con el aumento de la densidad de oxígeno atómico, el ozono experimenta un rápido crecimiento. La variación de ozono, en términos relativos, también supera la experimentada por el O₂(¹ Δ_g). Sin embargo, conforme la densidad de oxígeno atómico alcanza el límite de saturación, el crecimiento del ozono debería hacerse lineal en el tiempo. Tomando $\langle N_{\text{O}} \rangle_{\text{sat}} \sim 8 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, la tasa de generación de ozono debería ser $d\langle N_{\text{O}_3} \rangle / dt \sim 1.2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ para esos instantes, y un valor parecido se obtiene en el caso de O₂(¹ Δ_g). La recombinación del ozono con átomos de oxígeno solo llega a ser significativa cuando $\langle k_{13} N_{\text{O}} \rangle N_{\text{O}_2}^2 \sim \langle k_{22} N_{\text{O}} N_{\text{O}_3} \rangle$, lo que requeriría una densidad del ozono superior a $\langle N_{\text{O}_3} \rangle \sim 2 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$. Por el contrario, la recombinación con las moléculas de oxígeno excitado llegaría a ser notable cuando $\langle k_{13} N_{\text{O}} \rangle N_{\text{O}_2}^2 \sim \langle k_{24} N_{\text{O}_2}(\text{}^1\Delta_g) N_{\text{O}_3} \rangle$. Asumiendo que $\langle N_{\text{O}_2}(\text{}^1\Delta_g) \rangle \sim \langle N_{\text{O}_3} \rangle$, la densidad de ozono debería ser entonces, al menos, $\langle N_{\text{O}_3} \rangle \sim 10^{21} \text{ m}^{-3}$. Por consiguiente, la principal pérdida de ozono tendrá lugar, para tiempos suficientemente largos, por medio de la recombinación con las moléculas de oxígeno excitado, O₂(¹ Δ_g).

El efecto de la tensión aplicada sobre la distribución de especies cargadas

Las características de los pulsos de Trichel dependen de la tensión aplicada. Como prueba de ello, las observaciones experimentales manifiestan que tanto la frecuencia de los pulsos como la corriente media aumentan conforme lo hace la tensión aplicada^{1,51}. Cuando el aumento en la tensión es algo mayor, la descarga corona pasa del régimen de pulsos de Trichel a una descarga no pulsada tipo *glow*.

Para investigar el efecto del voltaje sobre la distribución del campo eléctrico y las especies cargadas, se ha simulado el aumento de la tensión aplicada durante el régimen de pulsos regulares. Para ello, en el instante 10 μs , se incrementó el valor de la tensión aplicada a un nuevo valor (−1875, −2000 y −2250 V) y se continuó la simulación hasta obtener nuevamente un régimen estable de pulsos de Trichel. Las frecuencias de los pulsos para las diferentes tensiones resultaron: 77 kHz (−1750 V), 93 kHz (−1875 V), 105 kHz (−2000 V) y 152 kHz (−2250 V).

Tanto la distribución espacial del campo eléctrico como de las especies cargadas mostradas en esta sección se corresponden con el pico de corriente de un pulso de Trichel regular en torno a 0.54 ms. De un lado en la Fig. 4.5-12 se muestra la distribución espacial del campo eléctrico en los diferentes casos, mientras que las respectivas distribuciones espaciales para las especies cargadas se representan en la Fig. 4.5-13 (electrones (a), iones positivos (b) e iones negativos (d)-(f)).

El aumento de la tensión aplicada afecta a la distribución del campo eléctrico en varios aspectos. En primer lugar, cerca del cátodo el campo eléctrico se refuerza. Aunque este aumento se va ralentizando progresivamente con el incremento de la tensión aplicada. En correspondencia con el refuerzo del campo eléctrico, las densidades de electrones e iones positivos (O_2^+ y O_4^+) aumentan dentro de la región de ionización. Así mismo, este refuerzo incentiva la formación del ion O^- dentro de esta región por medio de la captura disociativa de electrones con las moléculas de oxígeno (R2).

Sin embargo, con el aumento de la tensión aplicada, la región de colapso del campo eléctrico se extiende hacia el cátodo, y de este modo se contrae la región de ionización. Además, se acentúa el colapso del campo eléctrico como puede observarse en el recuadro interior de la Fig. 4.5-12. Este hecho tiene una consecuencia directa en la distribución de electrones e iones O^- en esta región, ya que con la intensificación del colapso se inhibe su producción. Por

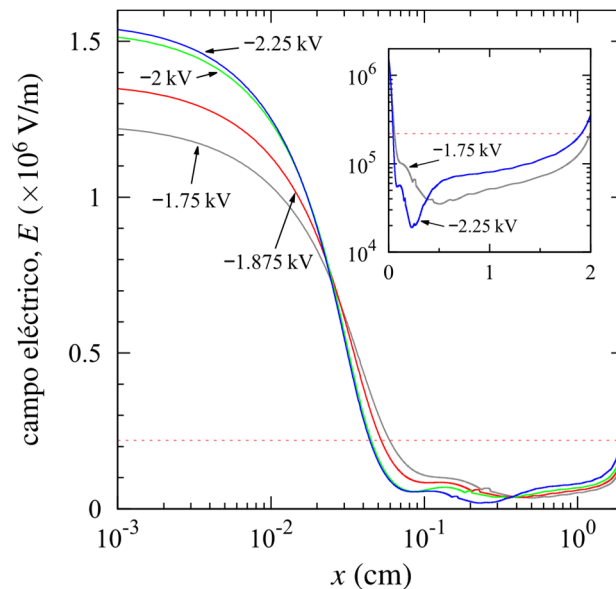


Fig. 4.5-12: Distribución espacial del campo eléctrico en el pico de corriente de un pulso regular de Trichel para las diferentes tensiones aplicadas.

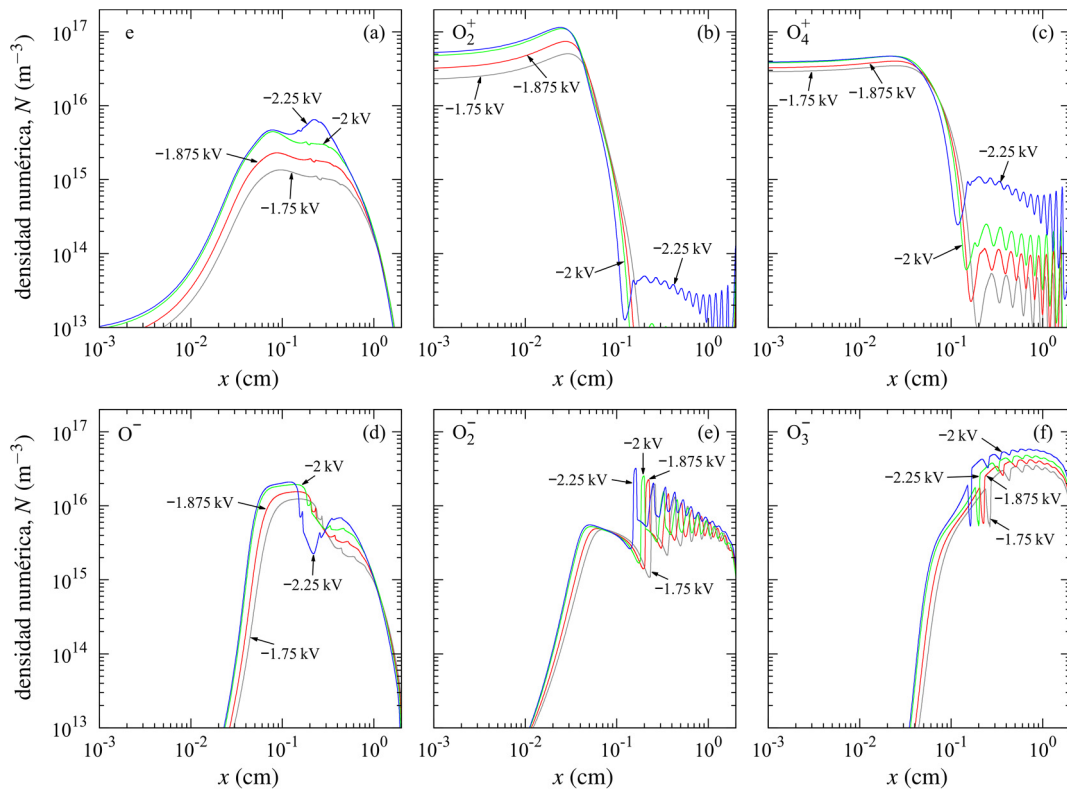


Fig. 4.5-13: Distribución espacial de electrones (a), iones positivos (b), (c) e iones negativos (d)-(f), correspondientes al pico de un pulso de Trichel para las diferentes tensiones aplicadas.

este motivo se observa la formación progresiva de un mínimo local de O^- con el aumento de la tensión aplicada.

En las proximidades del ánodo, una vez superada la región de colapso del campo eléctrico, éste recupera su valor y crece con el aumento de la tensión aplicada. Como se vio en la sección precedente, esta región está dominada por los iones negativos O_2^- y O_3^- , especialmente por este último. Las densidades de ambos iones aumentan con el incremento en la tensión aplicada, ya que su formación depende de la producción de O^- mediante la asociación de éstos con las moléculas de oxígeno. Durante el periodo entre pulsos, el desplazamiento de la carga negativa acumulada en esta región es la responsable de la componente continua (DC) de los pulsos de Trichel. En este sentido, el aumento de la componente DC de la corriente de la descarga con el incremento de la tensión aplicada puede entenderse a partir del aumento de los iones O_2^- y O_3^- , así como del campo eléctrico en esta región.

Finalmente, la presencia de iones positivos cerca del ánodo crece significativamente con el aumento de la tensión aplicada. Este hecho se explica por la proximidad entre el valor del campo eléctrico en la superficie

del ánodo y el valor umbral de éste, E^* , a partir del cual el efecto de la ionización supera la captura electrónica. Por tanto, cabe esperar que la recombinación entre iones positivos y negativos vaya ganando importancia progresivamente, por lo que debería incluirse en el modelo químico de la descarga.

4.6 Conclusiones

El uso de un modelo con múltiples especies revela la compleja dinámica por medio de la cual electrones, iones y especies neutras se interrelacionan a lo largo del desarrollo de la descarga. Las peculiaridades características del primer pulso son una consecuencia directa del hecho de que éste se desarrolle en ausencia de carga espacial, a diferencia de lo que ocurre en el caso del tren de pulsos posterior.

Durante el intervalo de tiempo asociado con el flanco de subida del primer pulso, la captura disociativa de electrones con moléculas de oxígeno convierten al ion O^- en el ion dominante en esta fase. La captura de tres cuerpos juega un papel crucial en la región de colapso del campo eléctrico, cuando la intensidad de corriente alcanza su valor máximo. Esto convierte al ion O_2^- en el ion predominante en la región donde el campo eléctrico es prácticamente cero. Finalmente, conforme la intensidad de corriente del primer pulso decae, el *clustering* de O^- con moléculas de oxígeno para formar O_3^- se convierte en la reacción principal.

A diferencia de lo que ocurre con el primer pulso, el tren posterior de pulsos (régimen de pulsos de Trichel) se desarrolla cuando en el volumen de la descarga existe un remanente de carga negativa debida a los pulsos previos. En estas condiciones, la fase de colapso del campo eléctrico es menos intensa y, con ello, la captura de tres cuerpos pierde su hegemonía como proceso dominante en las regiones de campo bajo. En su lugar, el proceso de transferencia de carga entre O^- y O_2 para formar O_2^- se convierte en la reacción principal en la región de campo débil. Durante el intervalo entre pulsos, la carga negativa está constituida esencialmente por los iones O_2^- y O_3^- . La distribución espacial de estos iones está segregada, hallándose los iones O_3^- más cerca del ánodo. La presencia de iones positivos solo llega a ser significativa durante el pico de corriente. Estos iones se generan vía ionización, aunque rápidamente se convierten en O_4^+ por medio de la captura del ion O_2^+ con moléculas de oxígeno.

Durante el desarrollo de un pulso regular (en el régimen de pulsos Trichel) también se forman especies neutras, tales como oxígeno atómico, estados excitados de las moléculas de oxígeno y ozono. No obstante, la producción de átomos de oxígeno así como de $O_2(^1\Delta_g)$ está limitada en el

transcurso de un pulso de Trichel, ya que la generación de estas especies está relacionada con el impacto de electrones con moléculas de oxígeno. Por el contrario, el ozono se origina mediante el *clustering* entre moléculas de oxígeno y átomos de oxígeno, por lo que su producción es continua y su crecimiento en el tiempo no refleja la ocurrencia de los pulsos de Trichel.

Con el aumento de la tensión aplicada al cátodo se refuerza el campo eléctrico en las proximidades de ambos electrodos, lo que se traduce en un aumento general de las densidades de electrones e iones. Por el contrario, en la región de colapso del campo eléctrico se acentúa su caída y, con ello, se inhibe la formación de O⁻ vía captura disociativa.

Apéndice

La Fig. A-1 muestra un diagrama completo de las curvas de potencial para O_2 , O_2^- y O_2^+ (Krupenie⁵²).

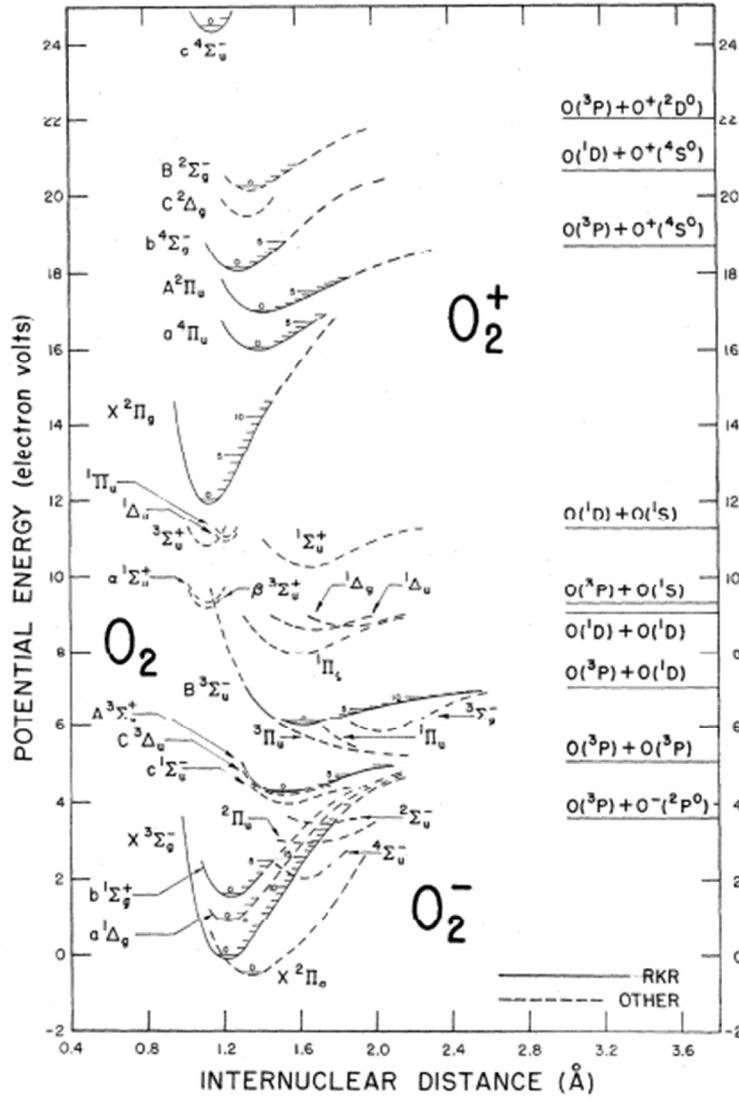


Fig. A-1: Curvas de energía potencial para O_2 , O_2^- y O_2^+ (imagen tomada de Krupenie⁵²).

Bibliografía

1. Trichel, G. W. The Mechanism of the Negative Point to Plane Corona Near Onset. *Phys. Rev.* **54**, 1078–1084 (1938).
2. Trichel, G. W. The mechanism of the positive point-to-plane corona in air at atmospheric pressure. *Phys. Rev.* **55**, 382 (1939).
3. Kip, A. Positive-Point-to-Plane Discharge in Air at Atmospheric Pressure. *Phys. Rev.* **54**, 139–146 (1938).
4. Kip, A. Onset Studies of Positive Point-to-Plane Corona in Air at Atmospheric Pressure. *Phys. Rev.* **55**, 549–556 (1939).
5. Loeb, L. B. & Leigh, W. Positive Needle Point Corona Studies at Atmospheric Pressure. *Phys Rev* **51**, 149 (1937).
6. Goldman, M. & Goldman, A. Corona Discharges, in *Gaseous Electronics I: Electrical Discharges*, ed. by M.N. Hirsh and H.J. Oskam. (Academic Press, New York, 1978).
7. Ray, S. *An Introduction to High Voltage Engineering*. (PHI Learning Pvt. Ltd., 2013).
8. Morrow, R. Theory of negative corona in oxygen. *Phys. Rev. A* **32**, 1799–1809 (1985).
9. Napartovich, A. P. *et al.* A numerical simulation of Trichel-pulse formation in a negative corona. *J. Phys. Appl. Phys.* **30**, 2726 (1997).
10. Soria-Hoyo, C., Pontiga, F. & Castellanos, A. Particle-in-cell simulation of electrical gas discharges. *J. Comput. Phys.* **171**, 47–78 (2001).
11. Akishev, Y. S., Kochetov, I. V., Loboiko, A. I. & Napartovich, A. P. Numerical simulations of Trichel pulses in a negative corona in air. *Plasma Phys. Rep.* **28**, 1049–1059 (2002).
12. Soria-Hoyo, C., Pontiga, F. & Castellanos, A. Particle-in-cell simulation of Trichel pulses in pure oxygen. *J. Phys. Appl. Phys.* **40**, 4552–4560 (2007).
13. Soria-Hoyo, C., Pontiga, F. & Castellanos, A. A PIC based procedure for the integration of multiple time scale problems in gas discharge physics. *J. Comput. Phys.* **228**, 1017–1029 (2009).
14. Tran, T. N., Golosnoy, I. O., Lewin, P. L. & Georghiou, G. E. Numerical modelling of negative discharges in air with experimental validation. *J. Phys. Appl. Phys.* **44**, 015203 (2011).
15. Sattari, P., Castle, G. S. P. & Adamiak, K. Numerical simulation of Trichel pulses in a negative corona discharge in air. *IEEE Trans. Ind. Appl.* **47**, 1935–1943 (2011).
16. Davies, A. J., Davies, C. S. & Evans, C. J. Computer simulation of rapidly developing gaseous discharges. *Proc. Inst. Electr. Eng.* **118**, 816–823 (1971).
17. Davies, A. J. & Evans, C. J. Field distortion in gaseous discharges between

- parallel-plate electrodes. *Proc. Inst. Electr. Eng.* **114**, 1547–1550 (1967).
18. Boris, J. P. & Book, D. L. Flux-corrected transport. I. SHASTA, A fluid transport algorithm that works. *J. Comput. Phys.* **11**, 38–69 (1973).
 19. Soria, C., Pontiga, F. & Castellanos, A. Plasma chemical and electrical modelling of a negative DC corona in pure oxygen. *Plasma Sources Sci. Technol.* **13**, 95 (2004).
 20. Durán-Olivencia, F. J., Pontiga, F. & Castellanos, A. Multi-species simulation of Trichel pulses in oxygen. *J. Phys. Appl. Phys.* **47**, 415203 (2014).
 21. Smirnov, B. M. *Physics of Ionized Gases*. (Wiley-VCH, 2001).
 22. Fridman, A. *Plasma Chemistry*. (Cambridge University Press, 2008).
 23. Fridman, A. & Kennedy, L. A. *Plasma Physics and Engineering*. (CRC Press, 2011).
 24. Smirnov, B. M. *Fundamentals of Ionized Gases: Basic Topics in Plasma Physics*. (Wiley-VCH, 2011).
 25. Itikawa, Y. Cross sections for electron collisions with oxygen molecules. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **38**, 1–20 (2009).
 26. Eliasson B. & Kogelschatz U. *Technical Report*. (Brown Boveri, 1986).
 27. Biagi-v8.9 database, www.lxcat.net, retrieved on March 12, 2015.
 28. Itikawa database, www.lxcat.net, retrieved on March 12, 2015.
 29. Morgan database, www.lxcat.net, retrieved on March 12, 2015.
 30. Krall, N. A. & Trivelpiece, A. W. *Principles of plasma physics*. (McGraw-Hill, 1973).
 31. Phelps, A. V. & Petrovic, Z. L. Cold-cathode discharges and breakdown in argon: surface and gas phase production of secondary electrons. *Plasma Sources Sci. Technol.* **8**, R21 (1999).
 32. Ibach, H. *Physics of Surfaces and Interfaces*. (Springer, 2006).
 33. Chorkendorff, I. & Niemantsverdriet, J. W. *Concepts of Modern Catalysis and Kinetics*. (Wiley-VCH, 2007).
 34. Hagelaar, G. J. M., de Hoog, F. J. & Kroesen, G. M. W. Boundary conditions in fluid models of gas discharges. *Phys Rev E* **62**, 1452–1454 (2000).
 35. McDaniel, E. W. *Collision phenomena in ionized gases*. (Wiley, 1964).
 36. Raizer, Y. P. *Gas Discharges Physics*. (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991).
 37. Gupta D., K., Mahajan, S. & I, J. P. Theory of step on leading edge of negative corona current pulse. *J. Phys. Appl. Phys.* **33**, 681 (2000).
 38. Bessières, D., Paillol, J. & Soulem, N. Negative corona triggering in air. *J. Appl. Phys.* **95**, 3943–3951 (2004).
 39. Hagelaar, G. J. M. <http://www.bolsig.laplace.univ-tlse.fr>.
 40. Hagelaar, G. J. M. & Pitchford, L. C. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models. *Plasma Sources Sci. Technol.* **14**, 722 (2005).

41. Lowke, J. J. & Davies, D. K. Properties of electric discharges sustained by a uniform source of ionization. *J. Appl. Phys.* **48**, 4991–5000 (1977).
42. Snuggs, R. M., Volz, D. J., Schummers, J. H., Martin, D. W. & McDaniel, E. W. Mobilities and Longitudinal Diffusion Coefficients of Mass-Identified Potassium Ions and Positive and Negative Oxygen Ions in Oxygen. *Phys Rev A* **3**, 477–487 (1971).
43. Massman, W. J. A review of the molecular diffusivities of H₂O, CO₂, CH₄, CO, O₃, SO₂, NH₃, N₂O, NO, and NO₂ in air, O₂ and N₂ near STP - polar and polyatomic gases. *Atmos. Environ.* **32**, 1111–1127 (1998).
44. Yanallah, K., Hadj Ziane, S. & Belasri, A. Ozone decomposition on walls. *Plasma Devices Oper.* **14**, 215–222 (2006).
45. Wickramanayaka, S., Meikle, S., Kobayashi, T., Hosokawa, N. & Hatanaka, Y. Measurements of catalytic efficiency of surfaces for the removal of atomic oxygen using NONO*₂ continuum. *J. Vac. Sci. Technol. A* **9**, 2999–3002 (1991).
46. Becker, K. H., Groth, W. & Schurath, U. The quenching of metastable molecules. *Chem. Phys. Lett.* **8**, 259–262 (1971).
47. Van Leer, B. Towards the ultimate conservative difference scheme I. The quest of monotonicity. in *Proceedings of the Third International Conference on Numerical Methods in Fluid Mechanics* 163–168 (Springer, 1973).
48. Van Leer, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *J. Comput. Phys.* **14**, 361–370 (1974).
49. Boris, J. P. & Book, D. L. Solution of continuity equations by the method of flux-corrected transport. *Control. Fusion* **1**, 85–129 (1976).
50. Cross, J. A., Morrow, R. & Haddad, G. N. Negative point-plane corona in oxygen. *J. Phys. Appl. Phys.* **19**, 1007–1017 (1986).
51. Lama, W. L. & Gallo, C. F. Systematic study of the electrical characteristics of the ‘Trichel’ current pulses from negative needle-to-plane coronas. *J. Appl. Phys.* **45**, 103–113 (1974).
52. Krupenie, P. H. The spectrum of molecular oxygen. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1**, 423–534 (1972).

Conclusiones

Conclusiones

1. Se ha elaborado una descripción microscópica consistente de las descargas eléctricas. Como resultado de este enfoque se han fijado ciertos límites (escalas de espacio y tiempo) que establecen el ámbito de aplicación de las ecuaciones clásicas (macroscópicas), basadas en una deducción heurística. A diferencia de la interpretación clásica, la condición de régimen hidrodinámico nos ha permitido acotar, de acuerdo a un criterio físico, el tamaño mínimo de la malla usado para resolver el sistema de ecuaciones correspondientes. Este hecho pone de relieve la conexión entre el problema físico y el numérico y, con ello, la posibilidad de usar limitadores no solo en el contexto numérico.
2. Una vez establecido el punto de contacto entre el problema físico y el numérico, y teniendo en cuenta que acotar el tamaño mínimo de la malla tiene un impacto directo en la estabilidad del esquema numérico, se ha analizado el papel de los diferentes términos del esquema (convección, difusión y reacción) en la estabilidad del mismo. Así, atendiendo al análisis de estabilidad, se ha construido un esquema numérico en el ámbito del FEM basado en la calidad de los esquemas Crank-Nicholson (CN) en lo que respecta a errores de difusión. Sin embargo, la imposibilidad de estos esquemas para amortiguar los errores que pueden aparecer en la solución hace que sean extremadamente sensibles a los cambios de alta frecuencia. Para paliar este problema se ha utilizado una formulación *streamline upwind Petrov Galerkin* (SUPG) para estabilizar los términos convectivos, en el contexto de la discretización espacial. En este sentido, se ha constatado la efectividad de este tipo de formulación analizando el impacto del factor de peso asociado al término estabilizador añadido a la formulación estándar. Por otra parte, en lo que concierne a la discretización temporal, se ha demostrado que la descripción *balanceada* (ϑ -method) de los esquemas CN ($\vartheta = 1/2$) estabiliza el esquema en situaciones donde los términos de reacción son dominantes. Así pues, el esquema adoptado para las simulaciones representa un híbrido CN+SUPG, donde los términos de estabilización de la formulación SUPG actúan a modo de limitador con objeto de optimizar (minimizar) el error en la fase.
3. Para contrastar la resolución del esquema numérico adoptado se ha analizado el problema de la descarga corona en una configuración punta-

plano (R. Morrow¹⁵, ref. cap. 3). Para ello se han comparado los resultados con los obtenidos en el problema original mediante diferencias finitas (FD) con una configuración de limitador FCT (*flux-corrected transport*). El excelente acuerdo encontrado pone de manifiesto la calidad de los esquemas utilizados así como la importancia de que los términos de estabilización SUPG actúen en modo limitador, ya que a pesar de introducir un error en la fase significativo, su impacto es mínimo o despreciable si se optimiza el factor de peso.

4. Este enfoque físico y numérico se ha completado con la formulación de un modelo químico consistente para la descarga (punta-plano) en oxígeno.
 - a) En lo que respecta a la ionización se ha mostrado que, en el contexto de la descarga corona, la vía no disociativa juega un papel principal, relegando a un segundo plano la vía disociativa así como la ionización por pasos.
 - b) La energía electrónica está estrechamente relacionada con el campo eléctrico y de ella depende la activación de numerosos procesos químicos. En el caso de la descarga corona el campo eléctrico es notablemente no uniforme, y la selección de las principales especies se ha realizado sobre la base de un análisis de pérdidas energéticas (*energy branching*). El modelo químico se ha completado incluyendo los principales iones y reacciones que se han determinado con modelos estacionarios. El resultado de este estudio ha revelado la compleja dinámica mediante la cual electrones, iones y especies neutras se interrelacionan. Particularmente, en la evolución del primer pulso (que se desarrolla en un región libre de carga), se ha observado la estrecha conexión entre los iones negativos (O^- , O_2^- , O_3^-). En este sentido, el ion O^- es dominante junto con el ion O_2^- , este último en la región de colapso del campo eléctrico. Por su parte, el ion O_3^- solo llega a ser significativo en la parte final de esta fase, una vez alcanzado el máximo de corriente. Para el tren de pulsos posterior, la distribución de carga negativa está formada esencialmente por O_2^- y O_3^- , el primero de éstos crece fundamentalmente por la conversión de O^- a O_2^- , perdiendo la captura de tres cuerpos su hegemonía como reacción dominante en la zona de campos bajos. Así mismo, la presencia de iones O_2^+ solo es significativa durante el pico de corriente, y rápidamente se convierten a O_4^+ . Se observa además que la distribución de especies está segregada en el volumen como resultado de la carga presente (debida a los pulsos previos) así como de la no uniformidad del campo eléctrico y la distorsión del mismo.