



Universidad Nacional
de Educación a
Distancia

Escuela Técnica Superior
de Ingeniería Informática



Universidad
Complutense de
Madrid

Facultad de
Informática



Laboratorio
Nacional
de Fusión

Centro de Investigaciones
Energéticas,
Medioambientales y
Tecnológicas
Laboratorio Nacional de
Fusión

ANÁLISIS AUTOMÁTICO DE DATOS EN MEDIDAS ESPECTROSCÓPICAS DE PLASMA EN EL STELLARATOR TJ-II

David Amador Roberto prueba

Director/a: Belén López-Miranda

Co-director: Jesús Antonio Vega Sánchez

Tutor: Sebastián Dormido Canto

Trabajo de Fin de Máster

Máster Universitario
en Ingeniería de Sistemas y Control

[Curso 2024-2025/Junio]

Agradecimientos

A Belén, Jesús y Sebastián por su ilusión y dedicación en la enseñanza.

A Luis, por convencerme de iniciar este viaje.

Y a Eva por recordarme—cuando más lo necesitaba— que también hay que descansar.

Resumen

La espectroscopia Doppler constituye una herramienta crucial para la investigación de plasmas de fusión en el marco de dispositivos de confinamiento magnético como el *stellarator* TJ-II. El tratamiento de las señales espectrales requiere algunas estrategias complejas, como la calibración espectral, la corrección de la tendencia de los datos experimentales y la eliminación de valores anómalos. Además, el ajuste gaussiano de los espectros permite obtener parámetros físicos relevantes como la temperatura iónica y la velocidad Doppler. Actualmente, en TJ-II, este análisis se lleva a cabo de forma no automatizada, lo que implica una carga de trabajo alta, un aumento de los errores humanos posibles y una trazabilidad pobre.

En este trabajo de fin de máster, se ha creado la interfaz gráfica de usuario (GUI) ITA (*Ion Temperature Analyzer*) como aplicación automatizada para el análisis de líneas espectrales de un sistema espectroscópico multicanal. Este instrumento software ejecuta todos los módulos elementales del procesado de señales espectroscópicas, trabajando tanto con información de calibración como experimental, usando métodos de preprocesamiento, estimación de parámetros instrumentales y cálculo de parámetros físicos.

Además, se ha implementado una base de datos relacional dentro de la aplicación para almacenar, gestionar, comparar y clasificar los resultados obtenidos. Esto convierte a ITA en una plataforma de trabajo preparada para ser utilizada por los investigadores del Laboratorio Nacional de Fusión de manera eficiente y rápida. El resultado es una herramienta robusta e intuitiva que acelera la investigación automatizando una gran cantidad de procesamiento y posibilita avanzar en el estudio de plasmas de fusión en el TJ-II.

Palabras clave: Fusión, plasma, *stellarator*, TJ-II, espectroscopia pasiva, ajuste gaussiano, temperatura iónica, velocidad Doppler, automatización del análisis, calibración espectral.

Abstract

Doppler spectroscopy is a crucial tool for investigating fusion plasmas in the framework of magnetic confinement fusion (MCF) devices such as the TJ-II stellarator. Processing spectral signals requires some complex strategies, such as spectral calibration, trend correction of experimental data, and outlier removal. In addition, the spectra Gaussian fit allows for obtaining relevant physical parameters such as ion temperature and Doppler velocity. Currently, in TJ-II, this analysis is carried out in a non-automated way, which implies a high workload, an increase in possible human errors, and poor traceability.

In this master's thesis, the graphical user interface (GUI) ITA (Ion Temperature Analyzer) has been created as an automated application for spectral line analysis of a multichannel spectroscopic system. This software instrument executes all the elementary modules of spectroscopic signal processing, dealing with both calibration and experimental information, using not only preprocessing methods but also instrumental parameter estimation and physical parameter calculation.

In addition, a query database has been implemented within the application to store, manage, compare, and classify the results obtained. This constitutes ITA as a working platform ready to be used by researchers at the National Fusion Laboratory in an efficient and rapid manner. The result can be a utilitarian, effective, and intuitive instrument that accelerates research and makes it possible to advance into the study of fusion plasmas at TJ-II.

Keywords: Fusion, plasma, *Stellarator*, TJ-II, passive spectroscopy, Gaussian fitting, ion temperature, Doppler velocity, analysis automation, spectral calibration.

Índice General

Capítulo 1 Introducción.....	1
1.1 Motivación.....	1
1.2 Propuesta y objetivos.....	1
1.3 Estructura del documento	2
Capítulo 2 Espectroscopia pasiva en el dispositivo TJ-II	4
2.1 Principios básicos de la fusión nuclear.....	4
2.2 El <i>stellarator</i> TJ-II.....	5
2.3 Espectroscopia pasiva en el TJ-II	6
2.4 Estado actual del análisis espectroscópico en el TJ-II	9
Capítulo 3 Desarrollo del software.....	11
3.1 Eliminación de la tendencia y del <i>offset</i>	12
3.2 Búsqueda de centros espectrales	15
3.3 Eliminación de <i>outliers</i>	16
3.4 Ajuste gaussiano.....	22
Capítulo 4 Análisis Espectroscópico	26
4.1 Dispersión espectral	26
4.2 Anchura Instrumental	28
4.3 Conversión espectral, temperatura iónica y velocidad Doppler.....	29
Capítulo 5 Resultados.....	34
5.1 Aplicación ITA.....	34
5.2 Base de datos de la aplicación ITA	40
Capítulo 6 Conclusiones y trabajos futuros.....	43

Índice de figuras

Figura 2.1.1. Fusión nuclear vs fisión nuclear	4
Figura 2.2.1. Vista cenital del dispositivo TJ-II rodeado de los diferentes diagnósticos para caracterizar el plasma.....	5
Figura 2.3.1. Configuración inicial del sistema de espectroscopia multicanal con 9 cuerdas de visión del plasma [7].....	7
Figura 2.3.2 Ilustración gráfica de los conceptos de offset (verde), la FWHM (rojo, entre l- y l+) y el shift (desplazamiento de l0 a l'0. Además, se incluye la expresión para el cálculo de temperatura iónica	8
Figura 2.4.1. Evolución de algunas de las señales típicas del plasma (densidad electrónica promediada de línea en rojo y energía contenida en el plasma en naranja) y monitorización de radiación (en verde y azul) para la descarga #56151, representativa de un plasma con calentamiento por microondas e inyección de haces neutros en el TJ-II. Obsérvese la ventana de adquisición del sistema espectroscópico.....	9
Figura 3.1 a Representación del contenido de un fichero .spe 72 canales con 400 píxeles. b Representación del contenido espectral de un canal del fichero .spe	11
Figura 3.1.1. Señal espectroscópica antes de la eliminación de la tendencia y el <i>offset</i>	12
Figura 3.1.2. Señal espectroscópica sin tendencia lineal ni <i>offset</i>	14
Figura 3.1.3. Comparativa entre la señal original, la señal tendencia lineal ni <i>offset</i> y la señal espectroscópica preprocesada	14
Figura 3.2.1 a. Señal Original, b. <i>Kernel</i> $\sigma = 5$ c. Señal Original convolucionada con un <i>Kernel</i> $\sigma = 5$	15
Figura 3.2.2. Proceso de detección de centros	16
Figura 3.3.1 Perfil espectral con tendencia y offset corregidos, centros aproximados y área de búsqueda (rectángulos verdes) de <i>maxAmplitud</i>	17
Figura 3.3.2 Detalle del algoritmo de detección de picos	18
Figura 3.3.3 Centros definitivos de la señal.....	18
Figura 3.3.4 Área de búsqueda (sombreada en rosa) de <i>outliers</i>	20
Figura 3.3.5 Clasificación de las posiciones con <i>outliers</i> (círculos rojos).....	21
Figura 3.3.6. Señal sin <i>outliers</i>	21
Figura 3.4.1 Ajuste Gaussiano del espectro (trazo azul).....	25
Figura 4.1.1 Lámpara de Hg con longitudes de onda 576.959 nm y 579.07 nm	26
Figura 4.1.2. Diagrama de bloques para la obtención de la dispersión lineal <i>m</i>	28
Figura 4.2.1. Espectros de una lámpara de Hg usada para el cálculo de la anchura instrumental	28
Figura 4.2.2 Diagrama de bloques para la obtención de la anchura a media altura del análisis de una lámpara de mercurio.....	29
Figura 4.3.1. Ejemplo de líneas espectrales brutas de un experimento con C v como impureza	30
Figura 4.3.2. Ajuste Gaussiano del experimento anterior con C v tras el procesado.....	30
Figura 4.3.3 Comparativa de las líneas espectrales de C v en el dominio de los píxeles y de las longitudes de onda	31
Figura 4.3.4 Temperatura iónica de los distintos perfiles de un experimento con impurezas de C v, con sus correspondientes barras de error	32
Figura 4.3.5 Velocidad Doppler de los distintos perfiles del elemento C v.....	33
Figura 5.1.1. Pestaña de carga y visualización de ficheros de calibración. En este ejemplo, con una lámpara de mercurio centrada en 546 nm (rectángulo rojo)	35
Figura 5.1.2. Pestaña de carga y visualización de carpetas con ficheros que contienen datos experimentales (enmarcado en amarillo). En el ejemplo, para la descarga #56151, adquirida en la fase NBI (en 1125 ms)	

con un tiempo de adquisición de 80 ms. La información del contenido de la carpeta permitirá crear la base de datos relacional para el análisis posterior	36
Figura 5.1.3. Pestaña de preprocesado y ajuste gaussiano de los ficheros de calibración para obtener la dispersión lineal del instrumento. En el ejemplo de emplea una lámpara de calibración de Hg (rectángulo rojo) con dos líneas espectrales bien definidas centradas en 576.959 y 579.07 nm. Los resultados de la calibración se muestran en la tabla adjunta (rectángulo negro)	37
Figura 5.1.4. Pestaña de preprocesado y ajuste gaussiano de los ficheros de calibración para determinar la anchura instrumental. En el ejemplo, se emplea una lámpara de calibración de Hg (rectángulo rojo) con una línea intensa y bien definida centrada en 546.074 nm. Además, los parámetros resultantes del ajuste se almacenan en una tabla para que el experimentador pueda cotejar los resultados (rectángulo negro) .	38
Figura 5.1.5. Pestaña de procesado y visualización de espectros de una descarga de C v. En el ejemplo, se muestra la descarga #56151. Se representa el canal 36 de los 72 adquiridos tanto en píxeles (rectángulo rojo) como en longitudes de onda (rectángulo verde) . Así mismo, aparecen representados los perfiles de Ti (rectángulo amarillo) y la velocidad Doppler (rectángulo azul) con sus correspondientes barras de error. El botón marcado en violeta permite cambiar la visualización de velocidad Doppler a <i>shift</i> y viceversa. Finalmente, el círculo magenta enmarca la tecla que permite cambiar a la pantalla de la base de datos relacional para el análisis posterior.	39
Figura 5.1.6. Pestaña de visualización de información sobre el ajuste gaussiano. En la figura se muestran, para cada canal, los principales parámetros del ajuste: el <i>background</i> (rectángulo rojo), la amplitud (rectángulo verde), el coeficiente de determinación <i>R2</i> (rectángulo azul celeste), el píxel central (rectángulo magenta), la desviación estándar (rectángulo amarillo) y la FWHM (rectángulo negro). Los canales cuyo <i>R2</i> es inferior al umbral preestablecido se marcan con cruces rojas para facilitar su identificación.....	40
Figura 5.2.1. Interfaz gráfica de la base de datos ITA.	42
Figura 6.1 Representación geométrica del sistema óptico y las cuerdas de visión utilizadas para determinar las cuerdas de visión y asignar los radios del plasma correspondientes	45

Índice de tablas

Tabla Glosario 1 Acrónimo/Abreviatura/Términos en inglés y su significado en castellano.....	14
Tabla 2.2.1 Especificaciones técnicas del <i>stellarator</i> TJ-II [6].....	6
Tabla 2.3.1 Líneas espectrales relevantes observadas en el TJ-II.....	10
Tabla 3.4.1 Elección de θ_0 , θ_{Lower} , θ_{Upper}	25

Glosario

A lo largo de este trabajo fin de máster se ha intentado traducir todos los términos y expresiones al castellano. Únicamente en aquellos casos donde la traducción pudiera llevar a confusión se ha mantenido el término o expresión en inglés.

Tabla Glosario 1 Acrónimo/Abreviatura/Términos en inglés y su significado en castellano

Acrónimo/ Abreviatura/Término en inglés	Significado
<i>Background</i>	Contribución no deseada al pico espectral de interés en la señal
<i>Binning</i>	Técnica de procesamiento que agrupa píxeles contiguos para formar un canal virtual
CIEMAT	Centro de investigaciones energéticas, medioambientales, y tecnológicas
ECRH (por sus siglas en inglés <i>Electron Cyclotron Resonance Heating</i>)	Calentamiento por resonancia ciclotrónica electrónica. TJ-II dispone de dos inyectores de microondas al doble de la frecuencia de resonancia de los electrones (53.2 GHz). Cada uno inyecta una potencia de unos 250 kW.
FWMH (por sus siglas en inglés <i>Full Width at Half Maximum</i>)	Anchura a media altura. Medida de la extensión de una curva, que indica la distancia entre los dos puntos donde la función gaussiana alcanza la mitad de su valor máximo.
GUI (por sus siglas en inglés <i>Graphical User Interface</i>)	Interfaz Gráfica de Usuario es una aplicación que permite al usuario interactuar con un sistema informático o un programa a través de elementos visuales como ventanas, iconos y menús. A diferencia de las interfaces de línea de comandos (CLI), las GUI son más intuitivas y fáciles de manejar por el usuario.
IQR (por sus siglas en inglés <i>InterQuartile Range</i>)	Rango Intercuartílico
ITA (por sus siglas en inglés <i>Ion Temperature Analyzer</i>)	Analizador de temperatura iónica
LNF	Laboratorio Nacional de Fusión
MCF (por sus siglas en inglés <i>Magnetic Confinement Fusion</i>)	Fusión por confinamiento magnético
NBI (por sus siglas en inglés <i>Neutral Beam Injection</i>)	Inyección de haces de átomos neutros. TJ-II dispone de dos inyectores de haces neutros (co- y contra-inyección, es decir, a favor o en contra del campo magnético, correspondientes a NBI1 y NBI2, respectivamente), cada uno de los cuales puede

producir \leq pulsos de 300 ms de hidrógeno neutro acelerado a 40 keV, para proporcionar hasta 1,0 MW de calentamiento adicional absorbido para densidades de electrones centrales de hasta $1,6 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$. Los haces también impulsan corriente en el plasma.

Offset

Desplazamiento constante o nivel base no deseado en una señal

Outliers

Valores atípicos o anómalos que se desvían del patrón general de una serie de datos.

Query

Solicitud específica formada por una palabra, frase o conjunto de frases, que el usuario introduce para obtener información o manipular datos de una base de datos, un motor de búsqueda o cualquier otra fuente de datos y así poder realizar una consulta relacional.

Shift or Doppler Shift

Desplazamiento espectral debido al efecto Doppler. El desplazamiento Doppler en espectroscopia es el cambio en la frecuencia de la luz (o de otras ondas electromagnéticas) debido al movimiento relativo entre la fuente y el observador. Este desplazamiento se manifiesta como un corrimiento en longitud de onda hacia el rojo (si la fuente se aleja) o hacia el azul (si la fuente se acerca). En espectroscopia, esto se observa como un cambio o desplazamiento en la posición de las líneas espectrales y se relaciona con parámetros físicos.

Capítulo 1 Introducción

En este capítulo se presenta la motivación que dio origen a la realización de este trabajo fin de máster (TFM), así como los objetivos que guiaron su desarrollo permitiendo alcanzar los resultados propuestos. En particular, se aborda el diseño y la implementación de una interfaz gráfica de usuario (GUI), desarrollada en MATLAB, orientada a la automatización del análisis de datos provenientes de medidas espectroscópicas realizadas en plasmas de fusión en el *stellarator* TJ-II. Finalmente, este capítulo concluye con una descripción detallada de la estructura del documento, proporcionando una visión general del contenido de cada uno de los capítulos que conforman la presente memoria.

1.1 Motivación

La espectroscopia se ha consolidado como una herramienta fundamental a la hora de monitorizar impurezas presentes en plasmas de fusión, permitiendo identificar elementos mediante el análisis de las líneas de emisión en distintas regiones del espectro electromagnético. En el caso del TJ-II, se emplean diferentes técnicas espectroscópicas. En concreto, en el trabajo que nos ocupa, los datos espectroscópicos se obtienen a través de un espectrómetro ACTON de 1 metro de distancia focal, que recoge 72 espectros por descarga, dando lugar a una base de datos de gran volumen. La motivación principal de este trabajo radica en la necesidad de optimizar y simplificar el procesamiento de esa amplia base de datos espectroscópicos, tarea que tradicionalmente se realiza de manera manual o semiautomatizada, lo que implica una inversión considerable de tiempo, un mayor riesgo de errores y una mayor dificultad a la hora de aprovechar los datos experimentales. A través del desarrollo de esta herramienta, se busca proporcionar una solución que facilite el tratamiento, visualización y organización de los datos experimentales, mejorando así la eficiencia del análisis y la reproducibilidad de los resultados.

1.2 Propuesta y objetivos

La propuesta central de este TFM consiste en el desarrollo de una herramienta *software* que permita automatizar el análisis de datos espectroscópicos obtenidos mediante espectroscopia pasiva en el *stellarator* TJ-II. Para ello, se plantea el diseño e implementación de una interfaz gráfica de usuario (GUI), desarrollada en MATLAB, orientada al estudio completo de datos experimentales, incluyendo la calibración de señales espectrales y posibilitando el análisis sistemático de los datos. Esta herramienta busca proporcionar una solución integral, eficiente y escalable para el tratamiento masivo de datos, con capacidades tanto analíticas como visuales, y con funcionalidades de gestión estructurada mediante bases de datos.

Para su consecución se persiguen los siguientes objetivos específicos:

- Diseñar una interfaz gráfica de usuario (GUI) intuitiva, funcional y robusta.
- Implementar un sistema que permita la selección diferenciada de ficheros de calibración y de experimentación.
- Automatizar el proceso de detección y eliminación de valores atípicos (*outliers*) en los datos espectroscópicos.
- Realizar ajustes gaussianos automáticos sobre las señales espectrales para la extracción de parámetros relevantes.
- Utilizar las herramientas desarrolladas para llevar a cabo procesos de calibración, con el fin de extraer información útil a partir de espectros de lámparas de calibración.

- Aplicar estas herramientas al análisis de datos provenientes de experimentos reales en el dispositivo de fusión TJ-II.
- Visualizar de forma clara e interactiva la información procesada para facilitar la interpretación por parte del usuario.
- Diseñar y crear una base de datos que permita la gestión, almacenamiento y posterior estudio de los resultados obtenidos durante los procesos de calibración y análisis.

Estos objetivos se alinean con la necesidad de dotar al Laboratorio Nacional de Fusión de una herramienta flexible que facilite el trabajo diario con grandes volúmenes de datos espectroscópicos, mejorando la productividad, reduciendo los errores manuales y permitiendo el desarrollo de estudios más sistemáticos y reproducibles. Como entregable final se proporciona una versión compilada de la herramienta, lo que permite su ejecución en cualquier computador sin tener la necesidad de que MATLAB esté instalado previamente. En este sentido, conviene mencionar la dificultad y el trabajo que ha llevado el poder conseguir la versión compilada con toda la funcionalidad de la herramienta plenamente operativa.

1.3 Estructura del documento

La presente memoria se organiza en seis capítulos, además de la bibliografía y los apéndices, cada uno de los cuales aborda un aspecto clave del trabajo realizado:

- **Capítulo 1: Introducción**

1.1 Motivación: Presenta el contexto científico del trabajo, destacando la relevancia del análisis espectroscópico en plasmas de fusión y la necesidad de automatizar estos procesos en el *stellarator* TJ-II.

1.2 Propuesta y objetivos: Define los objetivos específicos del TFM, incluyendo el desarrollo de una interfaz gráfica en MATLAB para la gestión y análisis automático de datos espectroscópicos.

1.3 Estructura del documento: Resume la organización del contenido y la lógica de los capítulos que conforman el trabajo.

- **Capítulo 2: Espectroscopia pasiva en el dispositivo TJ-II**

2.1 Fusión nuclear y el TJ-II: Introduce los principios básicos de la fusión nuclear y describe las características del *stellarator* TJ-II.

2.2 Espectroscopia pasiva en el TJ-II: Expone los fundamentos de la espectroscopia pasiva como técnica de diagnóstico en plasmas.

2.3 Estado actual del análisis espectroscópico en el TJ-II. Contextualiza las técnicas y métodos del análisis actual de los datos espectroscópicos para el TJ-II, así como plantea la necesidad de una mejora en el proceso.

- **Capítulo 3: Desarrollo del *software***

3.1 Eliminación de la tendencia y componente continua: Describe el proceso de supresión de una tendencia lineal en el *offset* de las líneas espectrales que se usan en el desarrollo, así como la eliminación de la componente continua.

3.2 Búsqueda de centros espectrales: Estrategia de apoyo que ofrece recomendaciones al usuario de las posiciones de los centros espectrales.

3.3 Eliminación de *outliers*: Detalla las herramientas matemáticas utilizadas en el proceso de supresión de valores anómalos en las señales espectroscópicas.

3.4 Ajuste Gaussiano: Algoritmo de extracción de parámetros de la función gaussiana con objeto de que dicha función se adapte a las líneas espectrales.

- **Capítulo 4: Análisis espectroscópico**

Se describe el proceso completo de calibración espectral, en el que se explican los conceptos de dispersión lineal y anchura instrumental y como estimarlos con el uso de lámparas de referencia. Además, se aborda la conversión píxel-longitud de onda, el cálculo de la temperatura iónica, la velocidad de rotación y el desplazamiento Doppler de descargas experimentales a partir de las calibraciones.

- **Capítulo 5: Resultados**

Se presenta la aplicación desarrollada, ITA, “*Ion Temperature Analyzer*”, los bloques funcionales que la componen y su interfaz gráfica. Se detalla también la base de datos creada para específicamente para la herramienta y sus funcionalidades de filtrado.

- **Capítulo 6: Conclusiones y trabajos futuros**

Resume los principales logros alcanzados, informa sobre las conferencias internacionales donde será usada la herramienta, discute las limitaciones detectadas durante el desarrollo y plantea posibles mejoras o ampliaciones para trabajos futuros.

- **Bibliografía**

Reúne todas las referencias bibliográficas utilizadas en la elaboración del presente trabajo, incluyendo artículos científicos, manuales técnicos y documentación de *software*.

- **Anexo A**

Tutorial de instalación de la aplicación ITA.

Anexo B

Manual de uso para el usuario de la aplicación ITA.

Capítulo 2 Espectroscopia pasiva en el dispositivo TJ-II

Este capítulo constituye el punto de partida técnico y conceptual para entender el contexto y la motivación que ha impulsado el desarrollo de la solución de ingeniería que se ha desarrollado a lo largo del presente TFM. Se presentan conceptos científicos básicos de la fusión nuclear y el papel del *stellarator* TJ-II como plataforma experimental. Posteriormente se describe el sistema espectroscópico implementado, así como una descripción breve del procedimiento actual de obtención de parámetros físicos y la necesidad de mejorar la eficiencia y velocidad del análisis del plasma de fusión.

2.1 Principios básicos de la fusión nuclear

La fusión es el mecanismo que alimenta las estrellas, incluido nuestro Sol, donde la enorme presión gravitatoria permite que los núcleos de hidrógeno se fusionen para formar helio. Puede definirse como el proceso mediante el cual dos núcleos atómicos ligeros, típicamente isótopos de hidrógeno, se combinan para formar un núcleo más pesado, liberando una gran cantidad de energía en el proceso. En concreto, en el caso de una reacción deuterio-tritio, se liberan 17.6 MeV. Una reacción de fusión es contraria a la fisión nuclear, donde un núcleo pesado al ser bombardeado con neutrones se divide en otros más ligeros. En ambos casos, la diferencia entre las masas de los reactivos y los productos se transforma en energía siguiendo la ecuación de Einstein de equivalencia de masa y energía. Puede apreciarse de forma simplificada la diferencia entre ambas reacciones en la Figura 2.1.1.

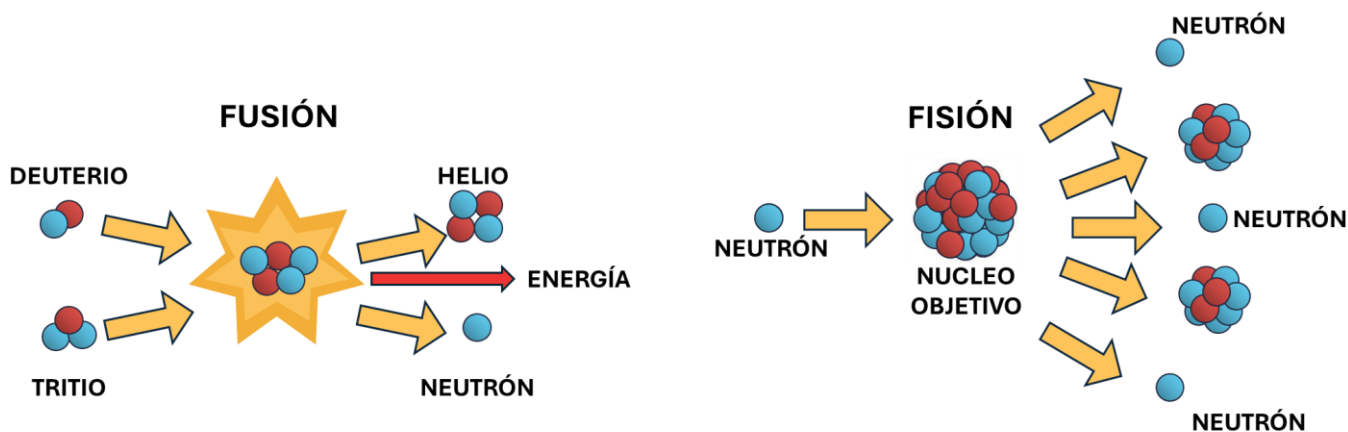


Figura 2.1.1. Fusión nuclear vs fisión nuclear

Para que la fusión se produzca, es necesario superar la barrera debida a la repulsión electrostática entre los núcleos, conocida como fuerza de Coulomb. En el interior de las estrellas, como se mencionó más arriba, esta barrera se supera gracias a los efectos gravitatorios asociados a la masa de las estrellas. En la Tierra, donde no se dispone de masas gravitacionales comparables, es necesario calentar los núcleos a temperaturas del orden de 100 millones Kelvin para proporcionar suficiente energía cinética a las partículas [1]. A esas temperaturas extremas, los átomos se ionizan completamente formando un plasma, el cuarto estado de la materia, compuesto por núcleos libres y electrones. La condición para que la fusión sea autosostenida en la Tierra está recogida en el llamado criterio de Lawson [2], que establece que el triple producto de la densidad del plasma, su temperatura y el tiempo de confinamiento debe superar un determinado umbral:

$$n \cdot T \cdot \tau_E > 5 \times 10^{21} \text{ m}^{-3} \cdot \text{keV} \cdot \text{s}$$

Existen dos enfoques principales para lograr el confinamiento de un plasma en la Tierra:

- **Confinamiento inercial:** se emplean láseres de alta potencia para comprimir y calentar pequeñas cápsulas de combustible. La fusión por confinamiento inercial escapa al objeto del presente TFM.
- **Confinamiento magnético:** utiliza campos magnéticos para mantener las partículas cargadas atrapadas, formando una especie de "botella magnética". El confinamiento magnético se consigue porque el plasma, aunque macroscópicamente neutro, está compuesto por partículas cargadas que se desplazan a lo largo de las líneas de campo describiendo trayectorias helicoidales. Para profundizar en el concepto de fusión por confinamiento magnético puede consultarse la referencia [3].

Dentro del confinamiento magnético, destacan dos dispositivos principales: los *tokamaks* [4] y los *stellarators* [5]. Ambos persiguen mantener el plasma caliente aislado del contacto con las paredes del dispositivo de fusión, evitando pérdidas de energía y contaminación del plasma. En este contexto, uno de los factores críticos que puede comprometer el éxito del proceso de fusión es la presencia de impurezas en el plasma. Se entiende por impureza todo elemento distinto del gas de trabajo. Estas impurezas, que pueden proceder de las paredes del dispositivo o de otros medios, incrementan las pérdidas radiactivas y provocan el enfriamiento localizado, cuya consecuencia es producir inestabilidades que desembocan en el colapso del plasma. Para el estudio de las impurezas y su evolución dentro del plasma, se emplean técnicas espectroscópicas que permiten identificarlas y caracterizarlas. La presente memoria se desarrolla en el contexto de la espectroscopia de plasmas de fusión por confinamiento magnético, concretamente en el dispositivo experimental TJ-II que se describe a continuación.

2.2 El *stellarator* TJ-II

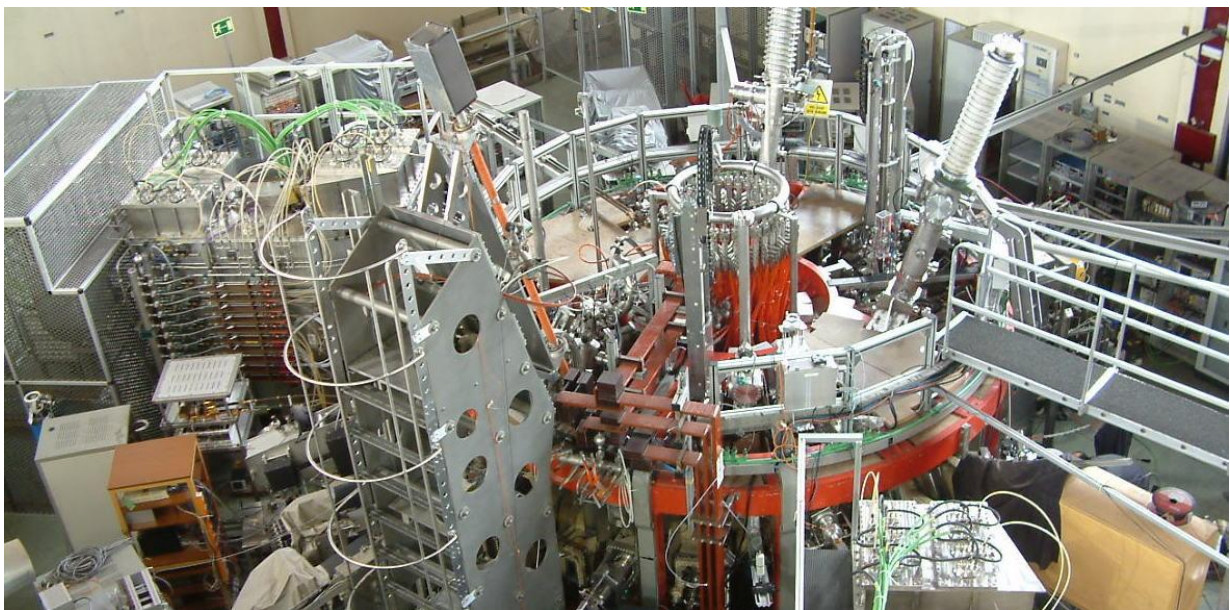


Figura 2.2.1. Vista cenital del dispositivo TJ-II rodeado de los diferentes diagnósticos para caracterizar el plasma

El TJ-II, (Figura 2.2.1), es un dispositivo experimental de fusión por confinamiento magnético (MCF) de tipo *stellarator* ubicado en el Laboratorio Nacional de Fusión (LNF), perteneciente al CIEMAT, en Madrid. Diseñado como una herramienta de investigación en física de plasmas, su principal propósito es estudiar el

plasma por confinamiento magnético y explorar fenómenos fundamentales para el desarrollo de futuros reactores de fusión controlada.

Se trata de un *stellarator* de tamaño medio, con una configuración helicoidal flexible, concretamente, un heliac de período 4, que proporciona una notable versatilidad para modificar el perfil del campo magnético y, con ello, explorar distintas configuraciones del plasma. Su sección transversal, con forma característica de "judía", permite realizar estudios detallados sobre transporte, estabilidad y comportamiento de las impurezas en distintas condiciones experimentales.

Tabla 2.2.1 Especificaciones técnicas del *stellarator* TJ-II [6]

Parámetro	Valor o descripción
Sistema de calentamiento 1	<i>ECRH</i> (<i>Electron Cyclotron Resonance Heating</i>): microondas de 53,2 GHz, calienta electrones
Sistema de calentamiento 2	<i>NBI</i> (<i>Neutral Beam Injection</i>): haces neutros de 10, 15 y 30 keV en co- y contra- inyección
Radio mayor	Aproximadamente 1,5 m
Radio menor	Inferior o igual a 0,22 m
Volumen efectivo del plasma	Hasta 1,1 m ³
Campo magnético toroidal máximo	1,1 T
Temperatura electrónica del plasma	Hasta 2 keV con <i>ECRH</i> , hasta 400 eV con <i>NBI</i> ;
Densidad electrónica	Hasta $1,7 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ con <i>ECRH</i> , hasta $5 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ con <i>NBI</i>
Gases de trabajo	Hidrógeno, deuterio y helio

Una descarga típica en el TJ-II se desarrolla en varias fases bien definidas. En primer lugar, se establecen las corrientes necesarias en las bobinas para configurar el campo magnético de confinamiento. A continuación, se introduce el gas de trabajo en la cámara de vacío. Tras ello, se activa el calentamiento mediante *ECRH*, seguido en muchos casos por el encendido del *NBI*. El plasma se mantiene en régimen estacionario durante un tiempo del orden de varios cientos de milisegundos antes de extinguirse.

Las investigaciones desarrolladas en el TJ-II han contribuido de forma significativa al conocimiento de procesos clave en física de plasmas, tales como el transporte anómalo, el control de impurezas y la generación de perfiles de corriente. Para ello se han empleado y desarrollado técnicas avanzadas de diagnóstico, entre las que destaca el análisis espectroscópico

2.3 Espectroscopia pasiva en el TJ-II

El TJ-II cuenta con una amplia variedad de diagnósticos, entre los que destaca un sistema espectroscópico

multicanal basado en espectroscopia pasiva¹ que consta de un espectrómetro tipo Czerny-Turner (ACTON Research, EE. UU.) equipado con 2 redes de difracción, una holográfica de 2400 l/mm y una segunda de 3600 l/m. de 1 metro de focal, especialmente concebido para el análisis de impurezas en plasmas de fusión. Este sistema obtiene datos que permiten el cálculo de parámetros clave como la temperatura iónica y la velocidad Doppler. Inicialmente, la señal óptica era recogida por un conjunto de nueve fibras de cuarzo, cada una enfocada de forma independiente sobre distintas cuerdas de visión del plasma [7]. Dada la complejidad de alineamiento y las pérdidas por zonas muertas, estas fibras fueron sustituidas por canales virtuales, generados por *binning*² y que se corresponden con cuerdas de visión lo que complica el análisis y aumenta la base de datos.

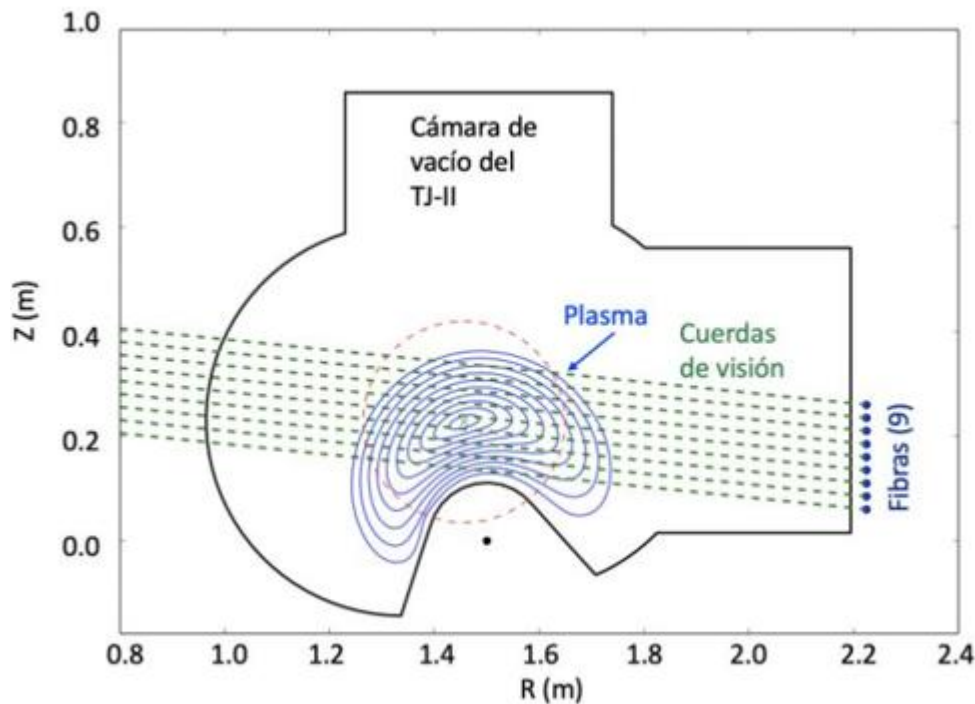


Figura 2.3.1. Configuración inicial del sistema de espectroscopia multicanal con 9 cuerdas de visión del plasma [7]

Estas cuerdas de visión se focalizan en el espectrómetro, mediante una lente planacromática para lograr una función instrumental gaussiana uniforme a lo largo del plano focal, lo que mejora la separación de canales y minimiza el solapamiento espectral [7]. En el plano focal del espectrómetro, se coloca el detector, un sensor tipo CCD retroiluminado de bajo ruido (modelo Spec-10:400B, *Roper Scientific Princeton Instruments*, EE. UU.) con un tamaño de píxel de $20 \times 20 \mu\text{m}$ en una matriz de 400×1340 píxeles. A diferencia de otros sistemas, los 400 píxeles están orientados a lo largo de la dirección de dispersión de la longitud de onda, los 1340 píxeles están orientados para recoger la luz de todo el diámetro del plasma y se utiliza un obturador mecánico durante la lectura. Posteriormente, los 1.340 píxeles se dividen en 72 canales. Esto representa una mejora significativa con respecto al sistema anterior del TJ-II, que se basaba, como se explicó más arriba, en 9 lentes con 9 fibras ópticas. El conjunto registra simultáneamente la información espectral y espacial. Con los datos obtenidos gracias al análisis del espectro se pueden calcular magnitudes físicas de gran relevancia en el ámbito de la investigación del plasma de fusión, como la temperatura iónica y la velocidad Doppler de los elementos en el

¹ **Espectroscopia pasiva** es la técnica que analiza la luz emitida naturalmente por el plasma, sin perturbarlo, mientras que la **espectroscopia activa** implica introducir una fuente externa (como un láser o impurezas) para inducir emisiones específicas.

² **Binning** es una técnica de agrupación de píxeles del detector para formar canales virtuales, sustituyendo a las fibras ópticas físicas, y se utiliza para definir las cuerdas de visión en el análisis espectroscópico del plasma.

No obstante, para la estimación de ambos parámetros, T_i y velocidad Doppler, es necesario corregir previamente los espectros de los efectos instrumentales introducidos por las condiciones de contorno del experimento y por el propio espectrómetro, como se detallará más adelante ([Capítulo 3](#) y [Capítulo 4](#)).

2.4 Estado actual del análisis espectroscópico en el TJ-II

En cada experimento, los datos que aporta el sistema espectroscópico tipo Czerny-Turner (ACTON Research, EE. UU.) y detector CCD se adquieren en un fichero con extensión .spe, que almacena la información de una descarga. Cada fichero contiene los datos de 72 canales espectrales (un canal espectral por cada fibra virtual) y, a su vez, cada canal virtual está compuesto por 400 puntos de muestreo o píxeles. La adquisición se realiza con el *software* comercial WinSpec 2.0, que permite configurar la ventana temporal de integración y el instante de inicio en función del tipo de estudio. Por ejemplo, para la línea de carbono C V, que es la impureza predominante en los plasmas de TJ-II y cuya emisión se centra típicamente en la longitud de onda de 227.093 nm, se emplean tiempos de integración comprendidos entre 40 y 120 ms, con inicio entre los 1080 y los 1140 ms desde el comienzo de la descarga. La Figura 2.4.1 muestra varias señales de radiación en verde y azul, así como la densidad electrónica (en rojo) y la energía contenida en el plasma para la descarga #56151. Además, se muestran las fases de calentamiento por microondas (ECRH) y por inyección de haces neutros (NBI). Durante esta fase se señala la ventana de adquisición del sistema espectroscópico (rectángulo naranja), comprendida entre 1125 ms y 1205 ms.

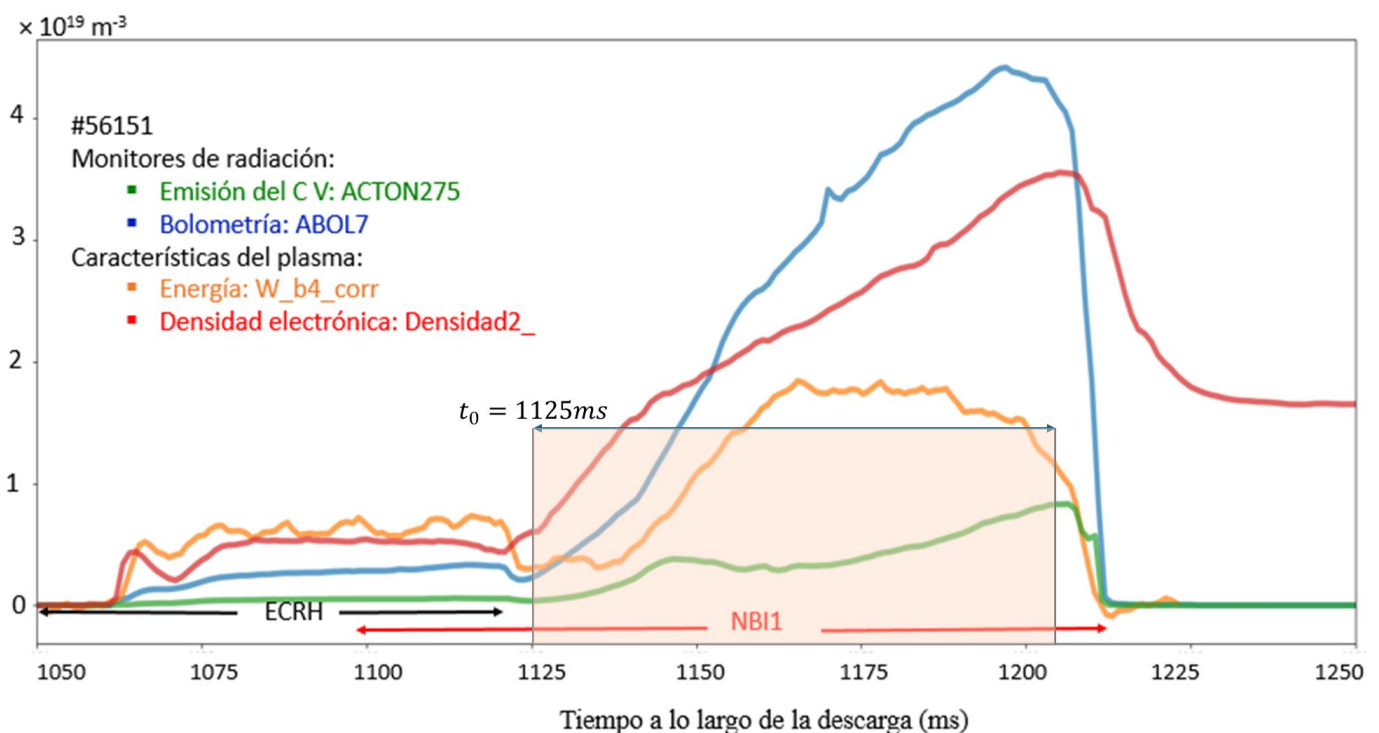


Figura 2.4.1. Evolución de algunas de las señales típicas del plasma (densidad electrónica promediada de línea en rojo y energía contenida en el plasma en naranja) y monitorización de radiación (en verde y azul) para la descarga #56151, representativa de un plasma con calentamiento por microondas e inyección de haces neutros en el TJ-II. Obsérvese la ventana de adquisición del sistema espectroscópico.

Las especies más relevantes quedan plasmadas en la tabla 2.3.1. Obsérvese que se pueden seleccionar líneas espectrales de los gases de trabajo (isótopos de hidrógeno) o impurezas (elementos distintos del gas de

trabajo).

Tabla 2.3.1 Líneas espectrales relevantes observadas en el TJ-II

Elemento	Longitud de Onda (nm)	Tipo
Hidrógeno-H α	656,281	Gas de trabajo
Hidrógeno-H β	486,133	Gas de trabajo
Hidrógeno-H γ	434,047	Gas de trabajo
Deuterio-D α	656,10	Gas de trabajo
Carbono-C V	227,09-227,73-227,79	Impureza
Carbono-C IV	253,0	Impureza
Carbono-C III	229,69	Impureza
Carbono-C II	657,80-658,29	Impureza
Carbono-C I	408,24-538,03	Impureza

El objetivo principal del análisis espectral es estudiar la acumulación y dinámica de las impurezas en el plasma, así como extraer información física relevante mediante espectroscopia. Para ello, resulta esencial conocer con precisión la posición en reposo de las líneas espectrales observadas, así como el ensanchamiento de la línea espectral, lo que requiere un proceso de calibración espectral fiable. Primero, se analizan los espectros de calibración tomados de distintas lámparas de referencia de tipo *pen*. Habitualmente para el C V se emplean lámparas de mercurio (Hg), que proporcionan referencias espectrales bien definidas. A partir de los espectros emitidos por estas lámparas se procesa de forma manual e individual la información de cada una de las lámparas de calibración, obteniendo los parámetros necesarios para mapear los píxeles del detector a longitudes de onda absolutas, para determinar la anchura instrumental (ensanchamiento propio del espectrómetro) y el decalaje, entendido como el desplazamiento de la línea de emisión introducida por el propio espectrómetro.

Una vez establecidas estas correspondencias, se pasa a procesar manualmente los ficheros de datos experimentales, repitiendo la secuencia del paso anterior. Gracias a este proceso es posible calcular de forma indirecta la velocidad del elemento, a partir del desplazamiento Doppler de la línea, y la temperatura iónica, a partir de su anchura a media altura corregida como se explicará en detalle en el Capítulo XXX.

Este proceso puede resultar ineficiente, repetitivo, propenso a errores humanos y difícil de escalar. Esto se agrava más con la transición tecnológica realizada en el TJ-II, ya que se pasa de trabajar con 9 fibras ópticas y un número reducido de canales a un sistema de 72 canales virtuales simultáneos que multiplican exponencialmente la carga de trabajo para cada experimento.

En este contexto surge la necesidad de desarrollar una herramienta versátil de automatización, capaz de integrar todas las etapas del análisis espectroscópico y que permita un tratamiento reproducible y eficiente para grandes volúmenes de datos. Esta necesidad constituye la motivación central del presente TFM, cuyo objetivo es diseñar e implementar una solución que supere las limitaciones del enfoque actual, optimizar la explotación científica de los datos obtenidos del TJ-II e integrar en un único entorno visual intuitivo tanto procesamiento como bases de datos para la explotación masiva de la información.

Capítulo 3 Desarrollo del software

El desarrollo de este trabajo se ha basado en el uso de la plataforma MATLAB, tanto para la implementación de los algoritmos de análisis espectroscópico como para la creación de una interfaz gráfica de usuario (GUI) mediante la herramienta *appdesigner*. La elección de MATLAB como entorno de trabajo ha respondido a su potencia en el tratamiento de datos numéricos, su facilidad para el diseño de interfaces visuales y la disponibilidad de funciones especializadas para el ajuste de datos experimentales.

Uno de los componentes fundamentales del proceso ha sido la lectura de ficheros con extensión *.spe*, que contienen la información espectral obtenida con el sistema espectroscópico (véase [Capítulo 2](#)) en los experimentos de plasma del *stellarator* TJ-II. Estos ficheros se originan desde una aplicación comercial (*WinSpec 2.0*) que es la que se utiliza para llevar a cabo la adquisición de los datos del espectrómetro, como se explicó en el Capítulo 2. Cada fichero *.spe* corresponde a una descarga del TJ-II y contiene 72 señales discretas con 400 píxeles cada una. Las 72 señales corresponden a 72 líneas de visión del plasma según se detalla en la Figura 3.1 y cada una determina un canal del sistema espectroscópico.

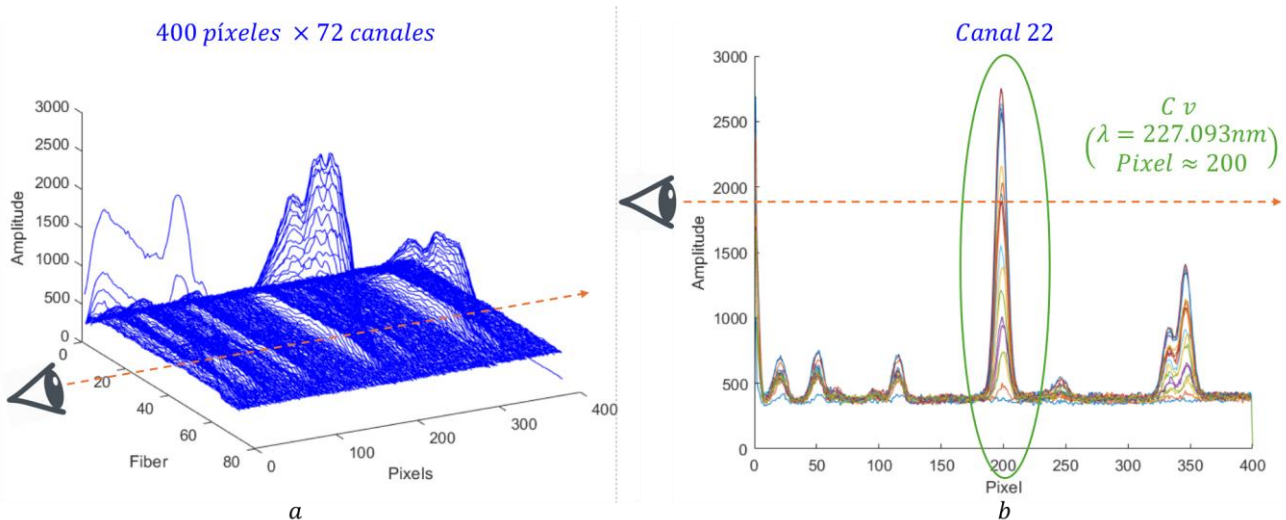


Figura 3.1 a Representación del contenido de un fichero *.spe* 72 canales con 400 píxeles. b Representación del contenido espectral de un canal del fichero *.spe*

La Figura 3.1.a, contiene 72 canales espectrales de impureza C v, donde la región de interés de los espectros se aprecia en el área verde de la Figura 3.1.b.

Para la lectura de los ficheros se ha seguido el manual del espectrómetro para conocer la estructura de los datos y se ha empleado un método basado en el trabajo de Carl Hall [8], inspirado en diversos desarrollos previos en Python y Java, como el script de Matt Clarke [9], el código de Stuart B. Wilkins [10] y el plugin de ImageJ para la importación de ficheros *.spe* [11]. La adaptación de este método a MATLAB ha permitido una lectura fiable y eficiente de los datos espectroscópicos imprescindible para el análisis.

Una vez importados los datos espectrales a la aplicación MATLAB, se han aplicado diferentes etapas de preprocesado, entre las que destacan:

- Eliminación de la tendencia instrumental de las señales y componente continua. Esta etapa permite asegurar que las mediciones se basen exclusivamente en la radiación emitida por la impureza o el gas de trabajo del plasma.
- Detección y eliminación de *outliers* mediante criterios estadísticos adaptados a la naturaleza de los datos espectroscópicos.
- Ajuste de perfiles gaussianos sobre las líneas espectrales. De esta manera se permite la extracción precisa de parámetros como la intensidad máxima, el desplazamiento de la línea o su anchura a

media altura (FWHM).

A partir de estos parámetros, se han calculado magnitudes físicas relevantes, como la temperatura iónica de las impurezas y las velocidades, siguiendo procedimientos basados en espectroscopia Doppler.

En este capítulo se describen en detalle todos los materiales empleados, las técnicas de procesado de señales implementadas y los algoritmos desarrollados para alcanzar los objetivos del TFM. Se establece así el marco técnico necesario para comprender los resultados obtenidos, que serán presentados en el capítulo siguiente (véase [Capítulo 4](#)).

3.1 Eliminación de la tendencia y del *offset*

La señal espectroscópica capturada en los experimentos del TJ-II presenta habitualmente una tendencia lineal de base y una componente continua u *offset* (Figura 3.1.1). Esto, si no se corrige adecuadamente, puede introducir errores significativos en el ajuste de perfiles espectrales y en la posterior extracción de parámetros físicos de interés.

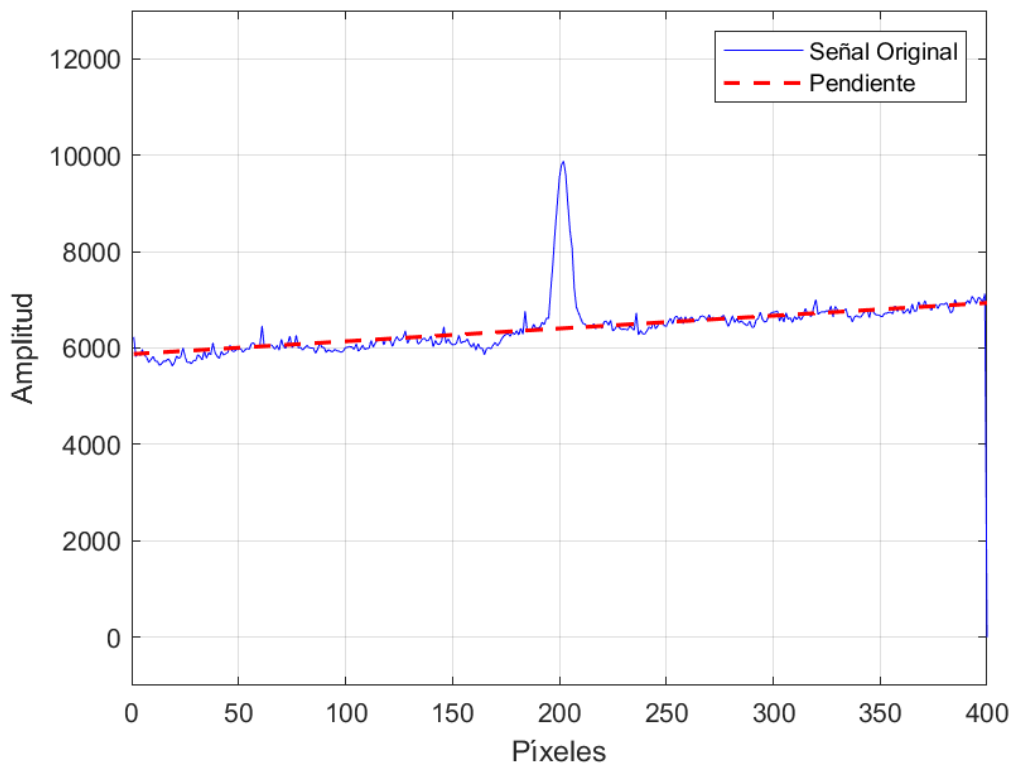


Figura 3.1.1. Señal espectroscópica antes de la eliminación de la tendencia y el *offset*

Para eliminar la tendencia y el *offset*, se ha desarrollado un procedimiento basado en dos etapas: corrección de inclinación de la señal y ajuste del nivel de base. Ambas operaciones se realizan sobre los datos originales antes de cualquier otro procesamiento.

En primer lugar, la señal se somete a un proceso para quitar la tendencia lineal, eliminando la componente lineal presente a lo largo de los píxeles del espectro (Fig. 3.1.1). Este procedimiento matemático consiste en ajustar una recta mediante mínimos cuadrados a los datos y sustraerla de la señal original. Formalmente, si $y(x)$ representa la señal registrada, se calcula:

$$y_{\text{ajustada}}(x) = y(x) - (ax + b) \quad 3.1.1$$

donde a y b son los coeficientes de la recta obtenida por ajuste lineal de $y(x)$. Para la realización del ajuste, en forma discreta, se supone la señal como un vector de datos $y = [y_1, \dots, y_N]^T$, donde N es número total de píxeles, y se modela la tendencia lineal como:

$$\widehat{y}_n = a n + b \quad 3.1.2$$

donde $n = 1, 2, \dots, N$ es el índice de muestra, a la pendiente y b la ordenada en el origen. Tras esto se seleccionan los términos a y b que minimizan el error cuadrático:

$$\min_{a,b} = \sum_{n=1}^N (y_n - (an + b))^2$$

En forma matricial se define la matriz de diseño:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & N \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$

y el vector de señal y . La solución de mínimos cuadrados viene dada por la expresión:

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T y.$$

Desplegando los componentes:

$$a = \frac{N \sum_{n=1}^N n y_n - (\sum_{n=1}^N n)(\sum_{n=1}^N y_n)}{N \sum_{n=1}^N n^2 - (\sum_{n=1}^N n)^2},$$

$$b = \frac{1}{N} \left(\sum_{n=1}^N y_n - a \sum_{n=1}^N n \right)$$

Una vez obtenidos los componentes la formula (3.1.1) resulta en:

$$\widehat{y}_n = [a \cdot 1 + b, a \cdot 2 + b, \dots, a \cdot N + b]^T$$

y la formula (3.1.2) será equivalente a:

$$y_{\text{ajustada}} = y - \widehat{y}$$

Para la realización de este cálculo se hace uso de la función `detrend` de MATLAB y su resultado comparativo respecto a la señal original puede observarse en la Figura 3.1.2.

Posteriormente, para la eliminación del *offset*, se busca el valor mínimo de la señal dentro de un rango seguro (excluyendo los dos extremos del espectro para evitar artefactos de borde). Este valor mínimo se interpreta como el nivel de *offset* residual y se sustrae de toda la señal. Matemáticamente, si y_{ajustada} es la señal tras el primer ajuste, el proceso se describe mediante:

$$y_{\text{final}}(x) = y_{\text{ajustada}}(x) - \min(y_{\text{ajustada}}(x)), x \in [2, N - 1]$$

donde la búsqueda del mínimo se realiza entre los píxeles 2 y $N - 1$ para evitar los posibles valores atípicos

en los bordes. Todo este proceso desemboca en la obtención de una señal preprocesada (véase la Figura 3.1.3), que permite el correcto tratamiento para dar sentido físico a los análisis posteriores: las intensidades medidas nunca han de ser negativas

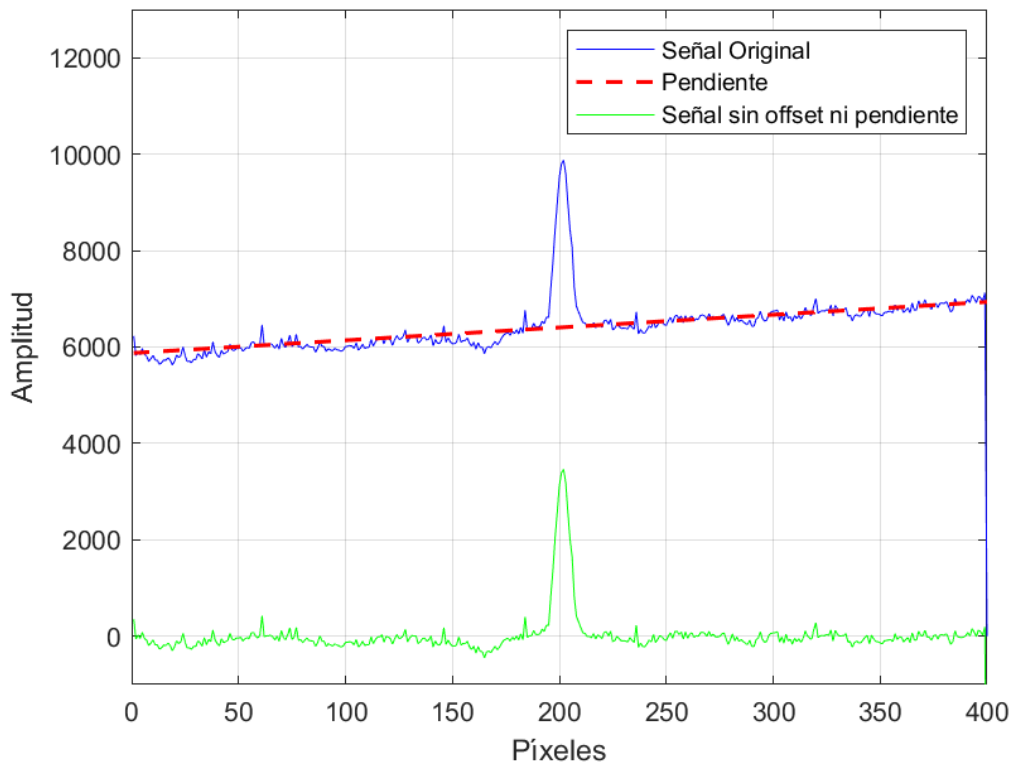


Figura 3.1.2. Señal espectroscópica sin tendencia lineal ni *offset*

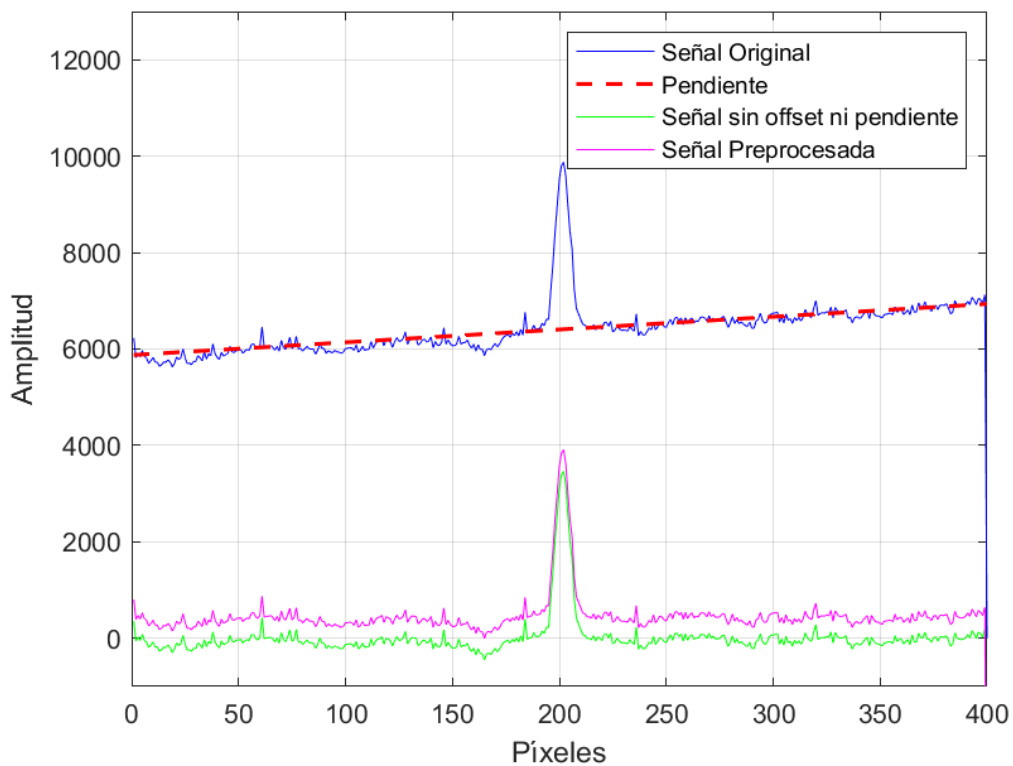


Figura 3.1.3. Comparativa entre la señal original, la señal tendencia lineal ni *offset* y la señal espectroscópica preprocesada

3.2 Búsqueda de centros espectrales

Aunque no forma parte de las especificaciones técnicas requeridas inicialmente, se ha desarrollado e integrado un sistema de detección automática de centros espectrales con el objetivo de mejorar la experiencia de uso de la herramienta. Esta funcionalidad ha sido diseñada como un elemento auxiliar que permite al usuario identificar rápidamente las posiciones centrales de las señales de interés, facilitando la configuración inicial de análisis y reduciendo la intervención manual. Esto resulta de especial utilidad para seleccionar la línea espectral relevante cuando en el espectro grabado aparecen diferentes líneas próximas a la de interés.

El procedimiento implementado se basa en la convolución de las señales espectrales con funciones gaussianas de diferentes anchuras, lo que permite atenuar tanto el ruido como la presencia de *outliers* y facilita la detección de los máximos relevantes. Esta técnica se inspira en el principio de suavizado mediante filtrado gaussiano, ampliamente utilizado en el tratamiento de señales y análisis de perfiles [12]. Para una señal discreta $s(x)$, como la que puede observarse en la Figura 3.2.1.a, el proceso de suavizado por convolución con un *kernel* gaussiano $g_\sigma(x)$, Figura 3.2.1.b, de desviación estándar σ se define como:

$$(s * g_\sigma)(x) = \sum_{k=-N}^N s(x-k) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \cdot e^{-\frac{k^2}{2\sigma^2}}$$

donde N depende del tamaño elegido para la ventana de convolución. El resultado queda representado en la Figura 3.2.1.c.

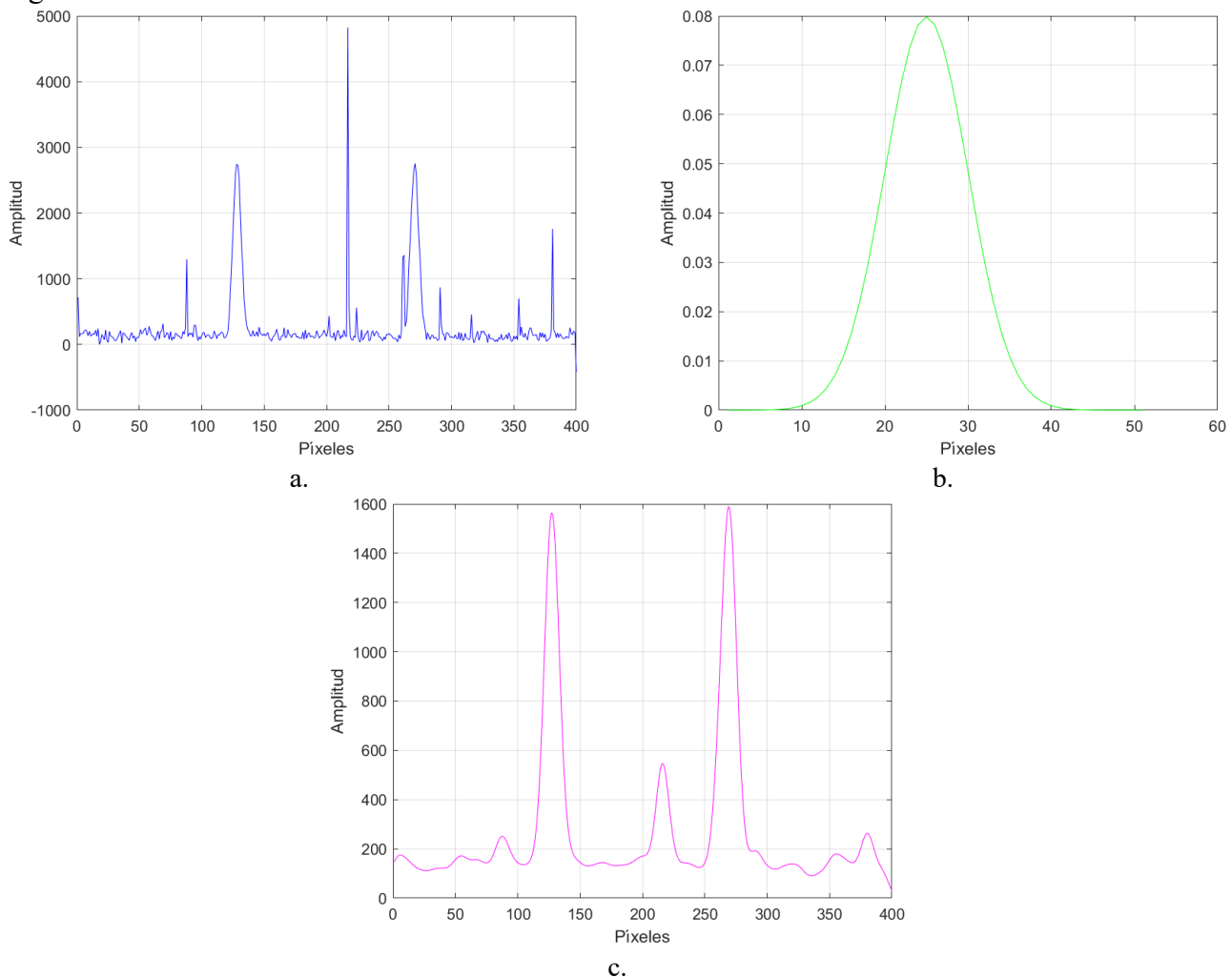


Figura 3.2.1 a. Señal Original, b. *Kernel* $\sigma = 5$ c. Señal Original convolucionada con un *Kernel* $\sigma = 5$

Una vez suavizada la señal, se detecta el valor máximo y se consideran centros todos los valores por encima del 85% del valor máximo, como puede observarse en la Figura 3.2.2.

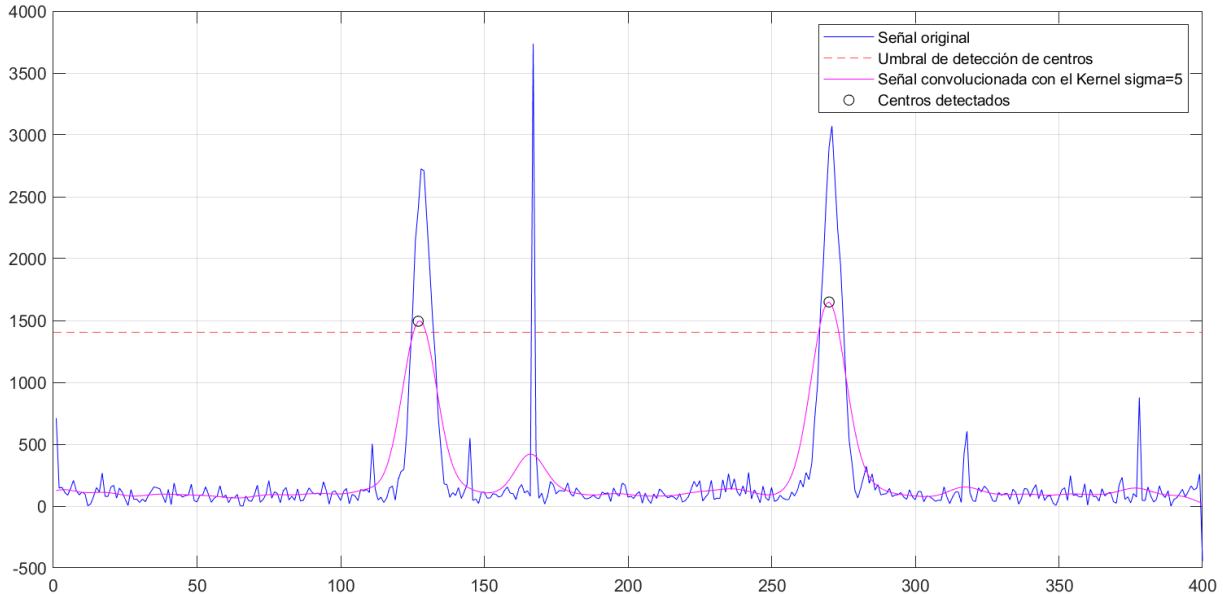


Figura 3.2.2. Proceso de detección de centros

Este procedimiento se repite aleatoriamente sobre varios perfiles dentro de una ventana centrada en el canal medio, y para distintos valores de σ , con el fin de asegurar la robustez del resultado frente a la variabilidad entre señales.

A lo largo de varios intentos, se acumulan los centros detectados. Si la dispersión de estos centros se mantiene dentro de un umbral máximo predefinido como 5 píxeles, se considera que la localización es estable y se devuelve el valor más frecuente (*moda*) como centro representativo. En caso contrario, se reinicia el proceso, hasta agotar el número máximo de intentos permitidos. Si tras todos los intentos no se cumple la condición de convergencia, se lanza una advertencia al usuario.

Este módulo de detección automática de centros permite reducir el tiempo necesario para iniciar el análisis de una descarga y mejora la operatividad general del sistema.

Es importante recordar que dentro de una misma descarga los datos adquiridos se componen de 72 espectros, los cuales pueden presentar ligeras variaciones en las posiciones de sus centros. Aunque los centros de las señales suelen encontrarse en regiones muy próximas entre sí, estas diferencias, aunque mínimas, pueden dificultar ciertos procesos automatizados si no se dispone de una referencia previa. Esta función proporciona una estimación precisa de la posición media, permitiendo centrar la atención en la región del espectro donde se concentra la información relevante optimizando así el procesado del resto de desarrollos.

3.3 Eliminación de *outliers*

Una vez corregido el *offset* y con una aproximación a los centros espectrales de interés, ya sea de forma manual por el usuario o haciendo uso del desarrollo del [apartado 3.2](#), es necesario identificar y eliminar los valores atípicos (*outliers*) presentes en las señales. Estos puntos anómalos, pueden introducir errores en el procesado espectral y afectar a la estimación de parámetros físicos. Su origen puede deberse a ruido electrónico o interferencias puntuales en la adquisición.

La estrategia implementada para su eliminación combina dos enfoques:

- La detección estructurada de las regiones donde se concentra la información espectral relevante.
- Aplicación de un filtro estadístico fuera de dichas regiones.

Para esto se trabaja con cada perfil de las descargas de forma independiente, sea esta señal discreta $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$ donde N coincide con los 400 píxeles. Usando la posición aproximada de donde deben

encontrarse los centros de cada perfil $c = (c_1, \dots, c_p)$, unido con un rango r donde se espera encontrar el centro exacto, se busca el valor máximo en torno a cada centro estimado c_i , tal como se muestra en la Figura 3.3.1, donde se observan los centros aproximados y las ventanas de búsqueda.

$$\text{maxAmplitud} = \max\{y_{c_1-r}, \dots, y_{c_1+r}, \dots, y_{c_p-r}, \dots, y_{c_p+r}\} \quad (3.3.1)$$

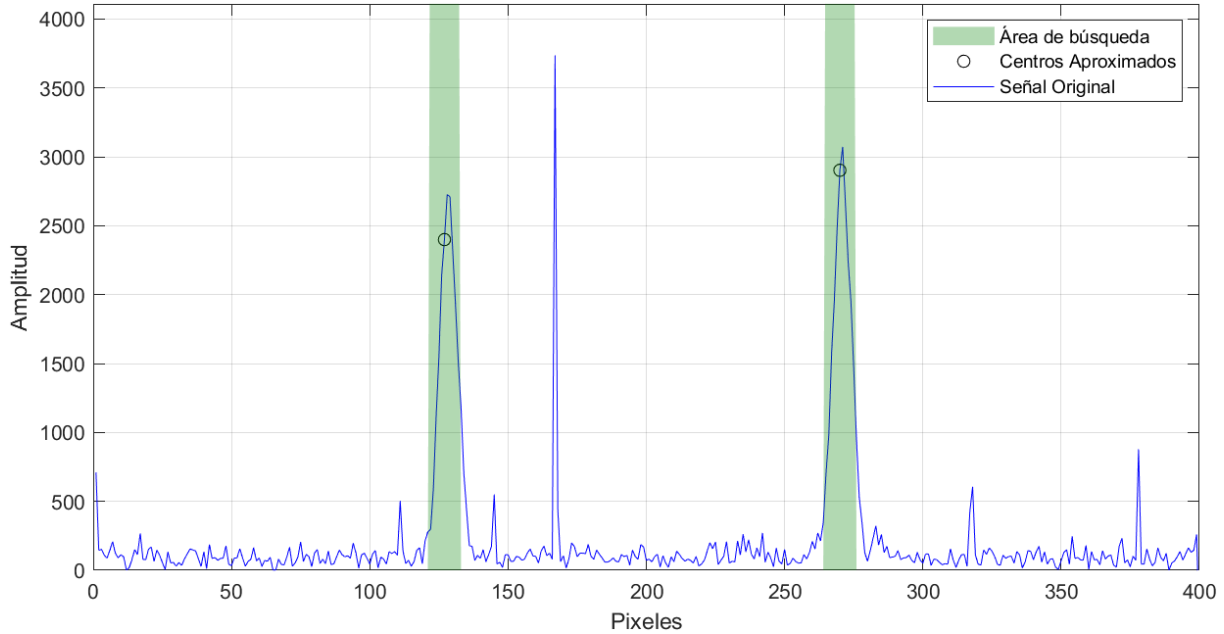


Figura 3.3.1 Perfil espectral con tendencia y offset corregidos, centros aproximados y área de búsqueda (rectángulos verdes) de maxAmplitud

A continuación, se analiza la señal en términos de su derivada discreta

$$d_n = y_{n+1} - y_n, \quad n = 1, \dots, N - 1$$

donde un índice n es un candidato a centro si la derivada cambia de positiva a negativa:

$$d_{n-1} > 0 \text{ y } d_n < 0$$

Si hay uno o más valores consecutivos iguales ($y_{n-1} = y_n = \dots = y_{n+m}$) se detecta el cambio de signo de $d_{n-2} \geq 0$ a $d_{n+m} < 0$ y se asigna como candidato a centro el punto medio de este rango. A continuación, se impone que dos candidatos deben separarse entre sí al menos una distancia D , en este desarrollo $D = 5$. Para esto se ordenan las candidaturas por altura y_n descendente, se recorre la lista manteniendo un pico si está a una distancia superior a D de los ya aceptados. Matemáticamente, si P es la lista de candidatos ordenados y S es el conjunto de picos aceptados:

$$\text{Acepta } n \in P \text{ sólo si } \forall m \in S: |n - m| \geq D$$

Una vez localizados estos puntos se eliminarán aquellos que tengan una amplitud superior al 80% del valor de maxAmplitud . El proceso de selección de picos mediante la derivada discreta y los criterios de separación y amplitud mínima se ilustran en la Figura 3.3.2

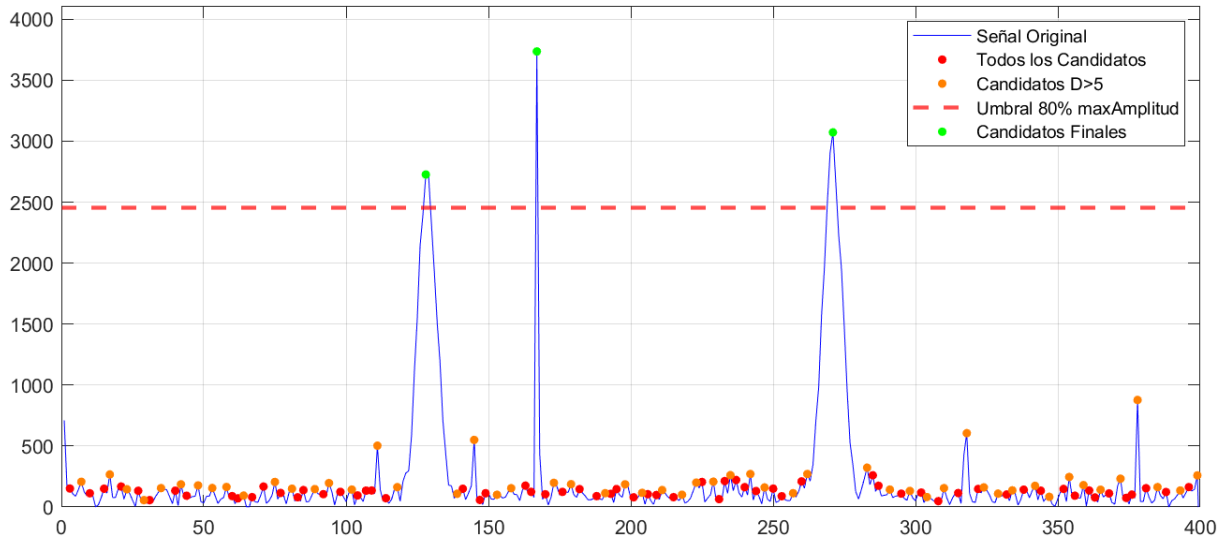


Figura 3.3.2 Detalle del algoritmo de detección de picos

Sean los índices de los candidatos filtrados tras el umbral los siguientes::

$$n_j, j = 1, \dots, M$$

y los centros aproximados

$$c_i, i = 1, \dots, p.$$

Para cada n_j se define la distancia a los distintos centros aproximados como:

$$d_{i,j} = |n_j - c_i|.$$

De cada $d_{i,j}$ se extrae la mínima distancia dada por la expresión:

$$\delta_j = \min_{1 \leq i \leq p} d_{i,j}$$

y se considera como centros definitivos aquellos cuya mínima distancia δ_j sea menor o igual que el rango r . Siguiendo este procedimiento se obtienen los índices donde se encuentran los centros definitivos, tal y como se muestra en la Figura 3.3.3.

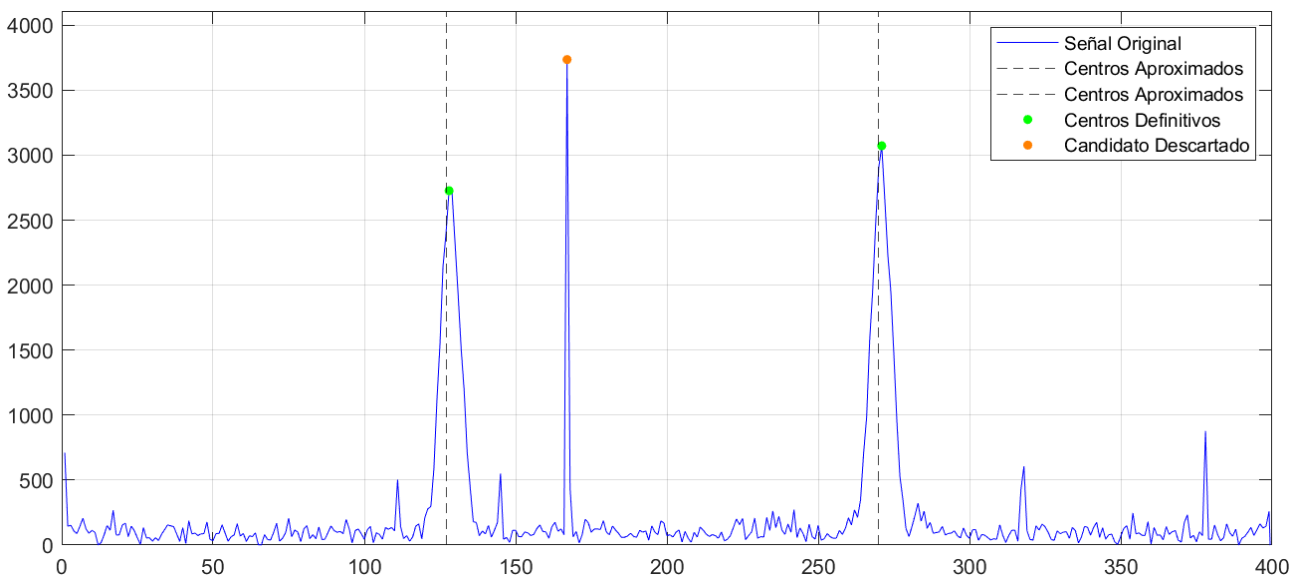


Figura 3.3.3 Centros definitivos de la señal

Para cada centro definitivo k con altura y_k , se define la amplitud media de la señal en ese centro como:

$$h_k = \frac{y_k}{2}.$$

Con esta información se pretende calcular las posiciones donde se alcanza el valor h_k :

- A izquierda, se busca $L < k$ mayor, tal que:

$$y_L < h_k, y_{L+1} > h_k.$$

- A derecha de forma análoga, $R > k$ más pequeño que cumple:

$$y_R < h_k, y_{R-1} > h_k.$$

Una vez asignados estos índices se interpolan las posiciones:

$$x_L = L + \frac{h_k - y_L}{y_{L+1} - y_L}, \quad x_R = R + \frac{h_k - y_R}{y_{R-1} - y_R}$$

con las cuales se puede calcular la FWHM, de la señal con centro en k como:

$$FWMH_k = x_R - x_L$$

Estimando que los espectros tienen un contorno cercano a una gaussiana pura, y que la anchura a media altura viene dada por:

$$FWMH_k = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2.355 \sigma.$$

Siendo σ la desviación estándar, que mide la dispersión de la curva en la distribución normal:

$$\sigma = \frac{FWMH_k}{2\sqrt{2 \ln 2}}$$

Dado que una distribución gaussiana es teóricamente infinita, pero el contenido de información útil está concentrado en torno al centro, se define la anchura total de la señal como el intervalo $[k - 1.5\sigma, k + 1.5\sigma]$, que abarca aproximadamente el 88,64 % de la información espectral. Se prefiere este intervalo reducido sobre el clásico $\pm 3\sigma$ (que cubriría el 99,73 %) con el fin de evitar incluir valores atípicos como parte del espectro.

Finalmente, esta región centrada en cada pico es la que se considera como zona útil de información espectral, mientras que la eliminación de *outliers* se aplica únicamente fuera de dichas regiones como se puede observar en la Figura 3.3.4.

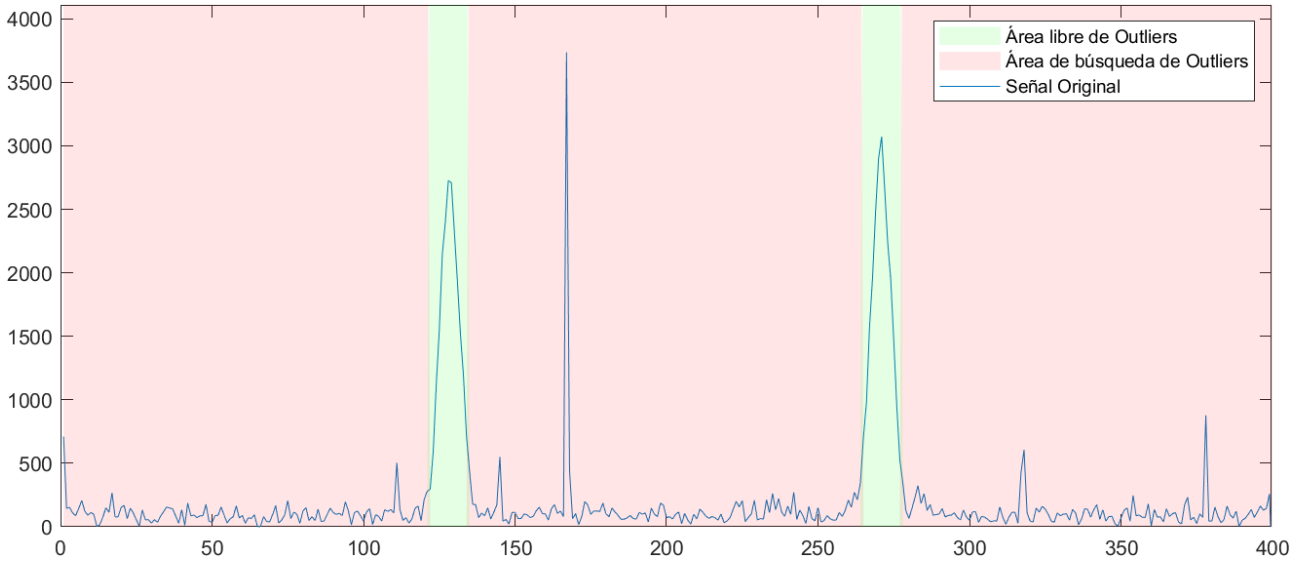


Figura 3.3.4 Área de búsqueda (sombreada en rosa) de outliers

De este modo, se preserva la información física de interés en la región \mathcal{G} , representada en la Figura 3.3.X como el área sombreada en verde. Mientras se descartan los valores anómalos que podrían afectar negativamente al ajuste posterior.

Para detectar estos *outliers*, se aplica un criterio estadístico robusto basado en cuartiles. El procedimiento consiste en analizar únicamente el subconjunto de muestras ubicado fuera de la región útil:

$$Y = \{y_n : n \notin \mathcal{G}\}$$

donde n recorre todos los píxeles que, como se observa en la Figura 3.3.X, aparecen en color rojo. A partir del conjunto Y , se ordenan los valores y se calculan el primer cuartil Q_1 y el tercer cuartil Q_3 , que corresponden a los percentiles 25 y 75 del conjunto, respectivamente. Con estos, se obtiene el rango intercuartílico:

$$\text{IQR} = Q_3 - Q_1.$$

A continuación, se define un factor de corte $x_{\text{IQR}} = 1.5$ y se establecen los umbrales inferior y superior para la detección de valores atípicos. Tras lo cual se define un factor de corte $x_{\text{IQR}} = 1.5$, y se establecen los umbrales:

$$T_{\min} = Q_1 - x_{\text{IQR}} \cdot \text{IQR}, \quad T_{\max} = Q_3 + x_{\text{IQR}} \cdot \text{IQR}.$$

Cada valor del conjunto Y se clasifica como *outlier* si está fuera de estos límites. Formalmente, para cada $n \notin \mathcal{G}$:

$$\text{Outlier}(n) = \begin{cases} \text{true}, & y_n < T_{\min} \vee y_n > T_{\max} \\ \text{false}, & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Este proceso genera un vector lógico que marca con valor *true* las posiciones que contienen valores atípicos y *false* aquellas que se consideran válidas. Al complementar este vector con la máscara que define la región \mathcal{G} , se obtiene una visión completa de las posiciones que deben excluirse del análisis, ya sea por pertenecer a zonas irrelevantes del espectro o por comportarse de forma anómala. Este resultado puede visualizarse en la Figura 3.3.5.

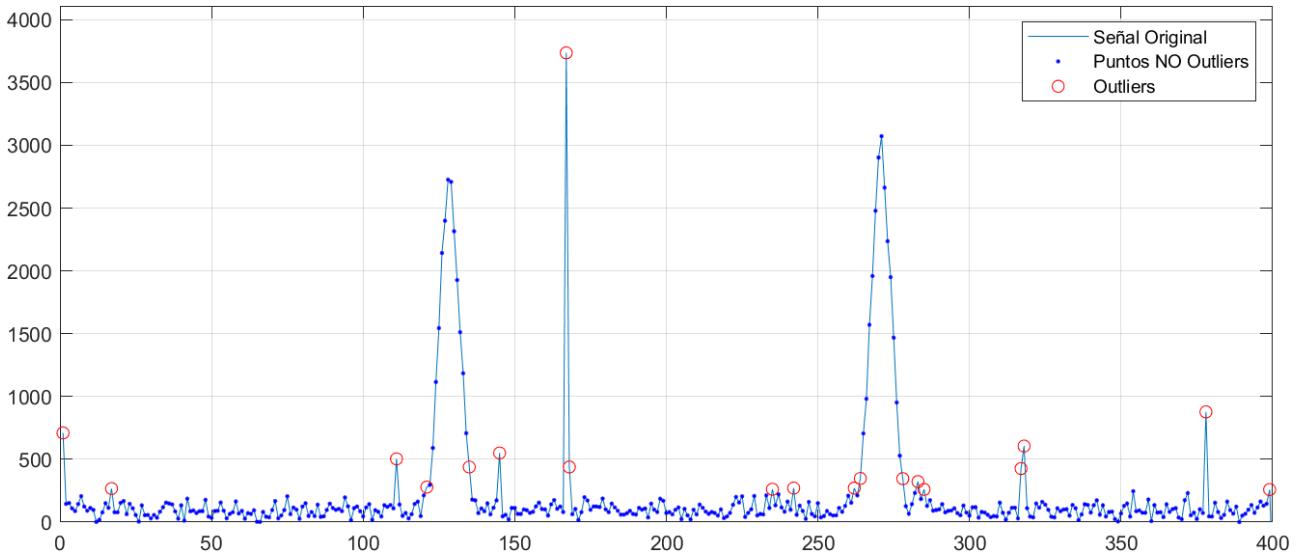


Figura 3.3.5 Clasificación de las posiciones con *outliers* (círculos rojos)



Figura 3.3.6. Señal sin *outliers*

Adicionalmente, se hace uso del vector lógico $Outlier(n)$, usando las posiciones en las que toma valor *false* para calcular el valor medio de la señal y así obtener el promedio de los valores que no son *outliers* ni pertenecen a la región \mathcal{G} . Sea B el conjunto de posiciones tal que $n \notin \mathcal{G}$ y $Outlier(n) = false$ se calcula el promedio tal que:

$$avg = \frac{1}{|B|} \sum_{n \in B} y_n \quad (3.3.2)$$

3.4 Ajuste gaussiano

Una vez eliminados la tendencia, el *offset* y los valores anómalos, la señal cumple las condiciones óptimas para continuar con el procesamiento. El siguiente objetivo es la obtención de parámetros de la señal, lo que permitirá el cálculo de las magnitudes físicas de interés. Sin embargo, conseguir estos parámetros haciendo uso de las señales brutas no es una tarea trivial. El ruido, las posibles asimetrías de las señales y efectos de la instrumentación son algunos de los problemas que dificultan esta tarea. Con el fin de abordar estas dificultades, y haciendo uso de la forma de las señales espectrales, se opta por realizar un ajuste gaussiano sobre ellas. Porque como pudo comprobarse en la Figura 3.1.1 o en la Figura 3.3.6, las líneas espectrales toman la forma aproximada de una o más funciones gaussianas. Esta técnica permite modelar matemáticamente la forma de los picos espectrales como funciones gaussianas, lo que permite obtener de forma robusta los parámetros objetivos. Para este fin se hará uso del algoritmo de Levenberg-Marquardt que se detallará más adelante. Para llevar a cabo el ajuste de estas señales, se opta por un modelo que refleje estas características

$$f(x) = a + \sum_{i=1}^N b_i \cdot e^{\left(-\left(\frac{x-c_i}{d_i}\right)^2\right)}$$

donde:

- a es el *offset* o nivel base de la señal.
- N es el número de picos a ajustar.
- b_i es la posición de la i -ésima gaussiana.
- c_i es la posición central del i -ésimo centro.
- d_i es su parámetro de dispersión tal que:

$$d_i = \sqrt{2} \sigma_i, \quad \sigma_i = \frac{d_i}{\sqrt{2}}$$

Estos serán los coeficientes que se busca estimar, creando el correspondiente vector de parámetros:

$$\theta = [a, \{b_j, c_j, d_j\}_{j=1..N}]^T, |\theta| = 3N + 1$$

de modo que la función modelo:

$$f(x, \theta) = a + \sum_{i=1}^N b_i \cdot e^{\left(-\left(\frac{x-c_i}{d_i}\right)^2\right)}$$

minimice la suma de cuadrados de los residuos:

$$S(\theta) = \sum_{n=1}^M [y_n - f(x_n; \theta)]^2 \quad (3.4.1)$$

donde M es el número total de puntos, o píxeles, de la señal.

Se busca una matriz jacobina $J \in \mathbb{R}^{M \times (3N+1)}$, para lo cual se agrupan todas las derivadas analíticas de cada punto x_n y para cada parámetro:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x_n, \theta^j)}{\partial a} &= 1, \\ \frac{\partial f(x_n, \theta^j)}{\partial b_j} &= e^{-((x_n - c_j)/d_j)^2}, \\ \frac{\partial f(x_n, \theta^j)}{\partial c_j} &= 2b_j \frac{x_n - c_j}{d_j^2} e^{-((x_n - c_j)/d_j)^2}, \\ \frac{\partial f(x_n, \theta^j)}{\partial d_j} &= 2b_j \frac{(x_n - c_j)^2}{d_j^3} e^{-((x_n - c_j)/d_j)^2}\end{aligned}$$

de forma que:

$$\begin{aligned}J_n &= \left[\frac{\partial f(x_n)}{\partial a}, \frac{\partial f(x_n, \theta^1)}{\partial b_1}, \frac{\partial f(x_n, \theta^1)}{\partial c_1}, \frac{\partial f(x_n, \theta^1)}{\partial d_1}, \dots, \frac{\partial f(x_n, \theta^N)}{\partial b_N}, \frac{\partial f(x_n, \theta^N)}{\partial c_N}, \frac{\partial f(x_n, \theta^N)}{\partial d_N} \right] \\ J &= \begin{bmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ J_n & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}_{M \times | \theta |}\end{aligned}\quad (3.4.2)$$

El algoritmo Levenberg-Marquardt, combina descenso por gradiente, siendo un método robusto a la hora de calcular la solución, pero lento, y Gauss-Newton más rápido, pero no tan exacto en el cálculo de la solución.

Mediante iteraciones se resuelve:

$$(J^T J + \lambda I) \Delta \theta = J^T r \quad (3.4.3)$$

donde:

- $\Delta \theta$ es el incremento que se aplica a los parámetros en la iteración k :

$$\theta^{(k+1)} = \theta^k + \Delta \theta$$

- λ es el parámetro de amortiguación, que controla la transición entre los regímenes:
 - λ cercano a 0, el término λI es despreciable y el método se comporta como Gauss-Newton.
 - λ grande, domina λI y el sistema actúa más como un descenso de gradiente.
- r es el vector de residuos, cuantifica píxel a píxel la diferencia entre la señal real y la función gaussiana con los parámetros θ en cada interacción k .

$$r = y - f(x, \theta^k) \quad (3.4.4)$$

El algoritmo sigue los siguientes pasos:

1. Inicialización:

Se elige θ^0 , también conocido como puntos iniciales o, técnicamente, *start points*, y fija λ_0 , usualmente entre 10^{-3} y 10^{-1} .

2. Cálculo de J y r

Se evalúan las fórmulas (3.4.2) y (3.4.4) con los valores actuales de θ^k y λ_k .

3. Construcción y resolución del sistema

Se resuelve la ecuación (3.4.3) para $\Delta\theta$, mediante *backslash* o Cholesky [13] [14]

4. Comprobación

Se define un $\theta^{trial} = \theta^k + \Delta\theta$ y se evalúa en la $S(\theta^{trial})$ en la ecuación (3.4.1).

5. Aceptación o rechazo

- Si $S(\theta^{trial}) < S(\theta^k)$ y $\theta^{trial} \in [\theta^{Lower}, \theta^{Upper}]$ se acepta $\theta^{(k+1)} = \theta^{trial}$ y se reduce $\lambda_{k+1} = \frac{\lambda_k}{10}$.
- Si $S(\theta^{trial}) > S(\theta^k)$ se rechaza que $\theta^{(k+1)} = \theta^{trial}$, y se aumenta $\lambda_{k+1} = \lambda_k \times 10$.

6. Criterio de parada

Si se cumple una de las siguientes condiciones el algoritmo se detiene:

- $\|\Delta\theta\| < \varepsilon_\theta$
- $|S(\theta^{k+1}) - S(\theta^k)| < \varepsilon_S$
- $k \geq k_{max}$

Siendo $\varepsilon_\theta = 10^{-8}$, $\varepsilon_S = 10^{-12}$, $k_{max} = 400$.

En caso de que no se cumpla ninguna de las condiciones el algoritmo se reanuda desde el paso 2.

Una vez finalizado el ajuste y obtenido el vector óptimo de parámetros θ^{optimo} se calcula el coeficiente de determinación R^2 . Para ello se calcula la suma de cuadrados total (SST):

$$SST = \sum_{n=1}^M (y_n - \bar{y})^2, \quad \bar{y} = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M y_n$$

que mide la varianza de la señal antes del ajuste, además, se calcula la suma de cuadrados de los residuos (SSR):

$$SSR = S(\theta^{optimo}) = \sum_{n=1}^M [y_n - f(x_n; \theta^{optimo})]^2$$

que mide la varianza de la señal después del ajuste.

Con estos parámetros se obtiene el coeficiente *R-squared*, R^2 :

$$R^2 = 1 - \frac{SSR}{SST} \quad (3.4.5)$$

Este coeficiente, toma valores entre 0 y 1, y determina la calidad del modelo para replicar los resultados. Siendo $R^2 = 0$ el modelo incapaz de ofrecer mejores predicciones que la media de la señal, y $R^2 = 1$ el modelo que explica completamente la variabilidad de ésta.

La definición de los valores θ^0 , θ^{Lower} , θ^{Upper} se puede comprobar en la Tabla 3.4.1

Tabla 3.4.1 Elección de θ^0 , θ^{Lower} , θ^{Upper}

Coefficiente	θ^{Lower}	θ^0	θ^{Upper}
a	0	avg	$1.5 \times avg$
b_i	0	$maxAmplitud$	$1.1 \times maxAmplitud$
c_i	$c_i - 5$	c_i	$c_i + 5$
d_i	1	4	10

Siendo $maxAmplitud$ y avg los resultados de las ecuaciones (3.3.1) y (3.3.2) respectivamente y c_i los centros aproximados, ya sean definidos por el usuario o tras el uso del algoritmo desarrollado en el [apartado 3.2](#).

Para el desarrollo de este apartado se ha optado por las funciones `fittype`, `fitoptions` y `fit` de MATLAB.

Es así como se obtiene un vector θ de parámetros que caracteriza de forma precisa el ajuste realizado al espectro. Con estos parámetros se construye una función que se adapta a la original, tal como puede comprobarse en la Figura 3.4.1 y que permite el cálculo de las magnitudes físicas de interés para el desarrollo de este proyecto.

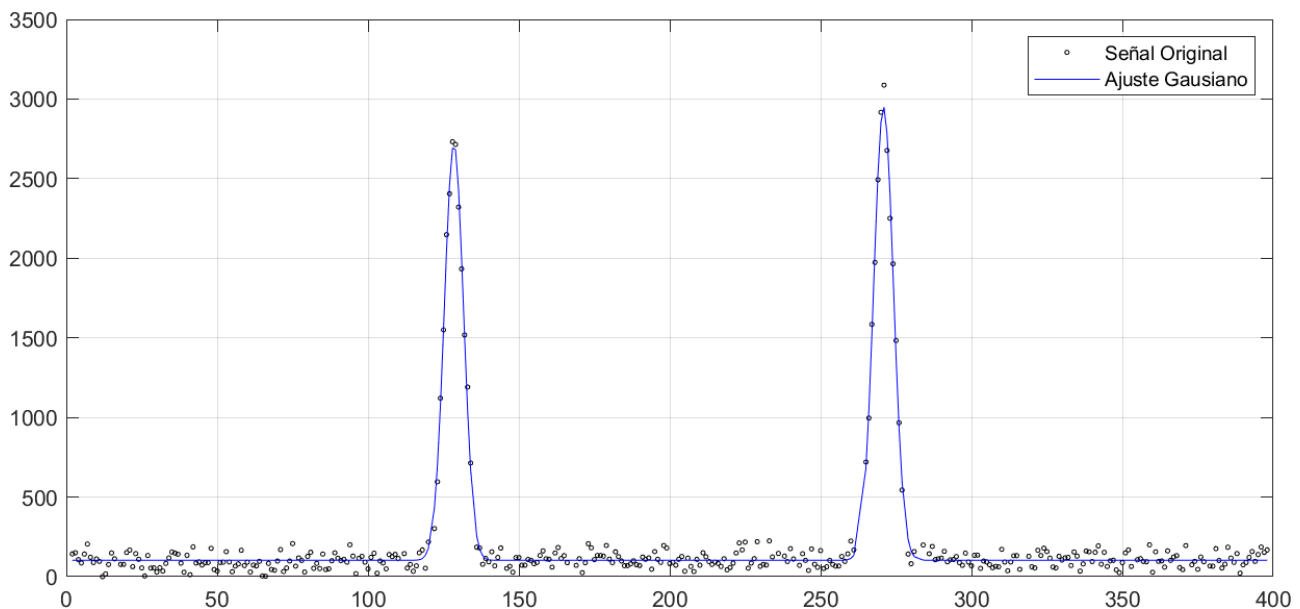


Figura 3.4.1 Ajuste Gaussiano del espectro (trazo azul)

Una vez definidos e implementados los procesos de corrección de tendencia, eliminación de *offset* y *outliers*, así como el ajuste gaussiano de las señales, en el siguiente capítulo se procede a aplicar estas técnicas para el análisis físico de los espectros adquiridos en plasmas de TJ-II. A partir de este punto, los algoritmos desarrollados adquieren una función práctica: permitir la extracción automatizada de parámetros físicos de interés.

Capítulo 4 Análisis Espectroscópico

Una vez finalizado el desarrollo software descrito en el [Capítulo 3](#) se dispone de todas las herramientas matemáticas necesarias para la obtención automatizada de información física de las señales espectrales. Sin embargo, todos los sistemas de adquisición espectral, y por ende el sistema espectroscópico utilizado en este trabajo, introducen distorsiones instrumentales en los datos originales. Estos factores alteran el cálculo de la temperatura iónica en el plasma y la relación entre los píxeles del detector y la correspondiente longitud de onda.

Por tanto, la correcta calibración constituye un paso esencial dentro del flujo de trabajo. A lo largo de este capítulo se describe el procesado necesario para la realización de las calibraciones, cuyo objetivo último es la corrección de la dispersión lineal y el ensanchamiento instrumental. Estas calibraciones se realizan utilizando lámparas espectrales de referencia, cuyas líneas de emisión son bien conocidas y se encuentran dentro del rango visible del espectrómetro [15].

Una vez obtenida la información de relevancia del proceso de calibración se describirá el proceso de cálculo de la temperatura iónica y la velocidad Doppler del plasma de fusión.

4.1 Dispersión espectral

Para realizar la calibración de la dispersión espectral, que es fundamental en la obtención de la relación entre los píxeles y las longitudes de onda real, se hace uso de una lámpara de referencia, habitualmente de mercurio, que posea dos líneas espectrales, de longitudes de onda conocidas. Para ilustrar este desarrollo se toma de ejemplo la que puede observarse en la Figura 4.1.1 con $\lambda_1 = 576.959 \text{ nm}$ y $\lambda_2 = 579.07 \text{ nm}$. Se configura el espectrómetro para que las longitudes de onda de interés coincidan con píxeles conocidos, el 130 y el 170 para este caso.

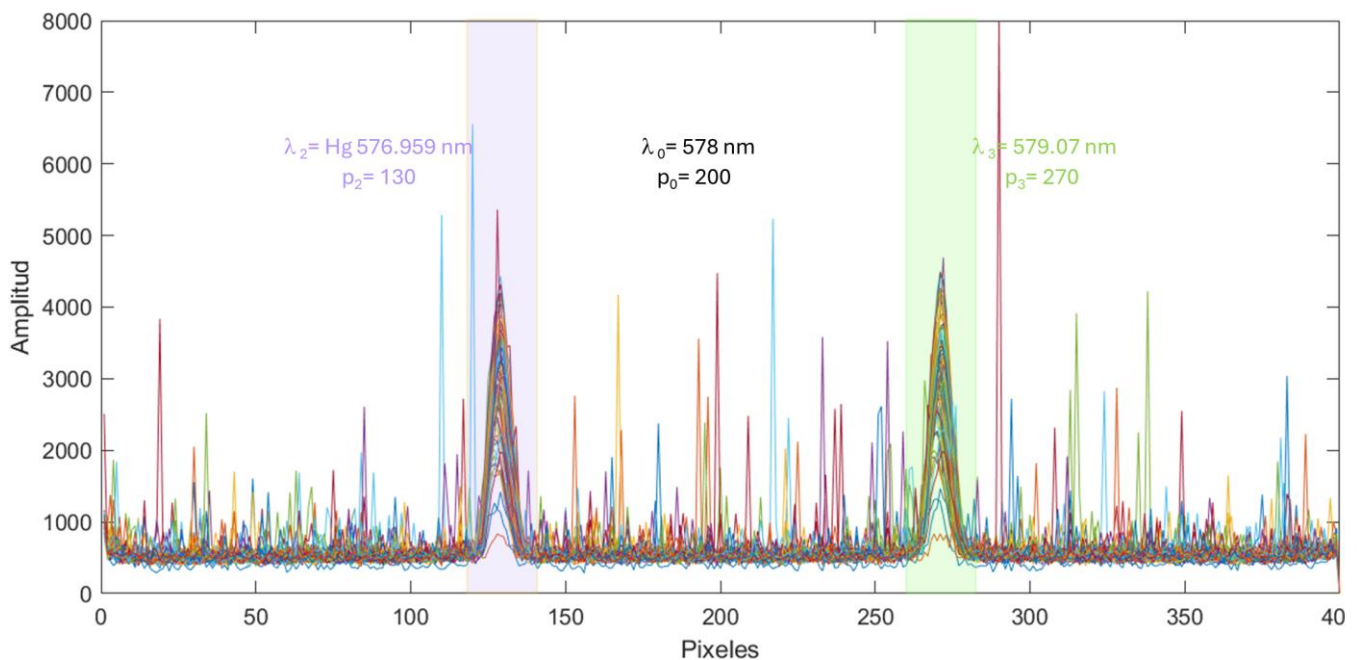


Figura 4.1.1 Lámpara de Hg con longitudes de onda 576.959 nm y 579.07 nm

De esta información puede determinarse el desplazamiento que sufren los píxeles asumiendo una relación lineal entre la longitud de onda y los píxeles:

$$\lambda(p) = m \cdot p + n$$

Como ya se explicó, la información espectral que se obtiene en el sistema espectroscópico corresponde a 72 perfiles de señales espectrales, por lo que haciendo uso de la lámpara se obtienen 72 pares ordenados por cada línea espectral de forma que los pixeles centrales de cada línea forman 72 pares ordenados $(p_{1-1}, \dots, p_{1-72})$ y 72 pares ordenados $(p_{2-1}, \dots, p_{2-72})$. Con estos se realiza regresiones lineales:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= m \cdot p_{1-1} + n \\ &\vdots \\ \lambda_1 &= m \cdot p_{1-72} + n \\ \lambda_2 &= m \cdot p_{2-1} + n \\ &\vdots \\ \lambda_2 &= m \cdot p_{2-72} + n \end{aligned}$$

Siendo la pendiente de la recta del ajuste m la dispersión lineal del espectro y poseyendo unidades de $\left(\frac{nm}{\text{pixel}}\right)$ y n la ordenada en el origen. Una vez que se ha esclarecido cómo calcular la dispersión lineal resta determinar los distintos pixeles centrales de los 72 perfiles de la señal espectral; es aquí cuando se hará uso de las herramientas desarrolladas en el Capítulo 3.

Una vez escogida la lámpara de calibración que se usará para el cálculo de la dispersión lineal, para cada perfil de ésta se realizan los siguientes pasos:

1. Se eliminan la tendencia lineal y el *offset*.
2. Se escogen, ya sea de forma manual o automática, los centros aproximados de las líneas espectrales.
3. Eliminación de los *outliers*.
4. Obtención de los parámetros θ_n del ajuste gaussiano.

Para el caso de una lámpara que posee dos líneas espectrales se obtendrán los parámetros:

$$\theta = \begin{bmatrix} a & b_{1-1} & c_{1-1} & d_{1-1} & b_{2-1} & c_{2-1} & d_{2-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a & b_{1-n} & c_{1-n} & d_{1-n} & b_{2-n} & c_{2-n} & d_{2-n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a & b_{1-72} & c_{1-72} & d_{1-72} & b_{2-72} & c_{2-72} & d_{2-72} \end{bmatrix}$$

Siendo $c_{1-1} \dots c_{1-72}$ 72 pares ordenados y $c_{2-1} \dots c_{2-72}$ otros 72 pares ordenados. Por lo que realizando una regresión lineal a:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= m \cdot c_{1-1} + n \\ &\vdots \\ \lambda_1 &= m \cdot c_{1-72} + n \\ \lambda_2 &= m \cdot c_{2-1} + n \\ &\vdots \\ \lambda_2 &= m \cdot c_{2-72} + n \end{aligned}$$

Finalmente se obtiene la dispersión lineal $m \left(\frac{nm}{\text{pixel}}\right)$. Todo este razonamiento se puede resumir en el diagrama de bloques de la Figura 4.1.2

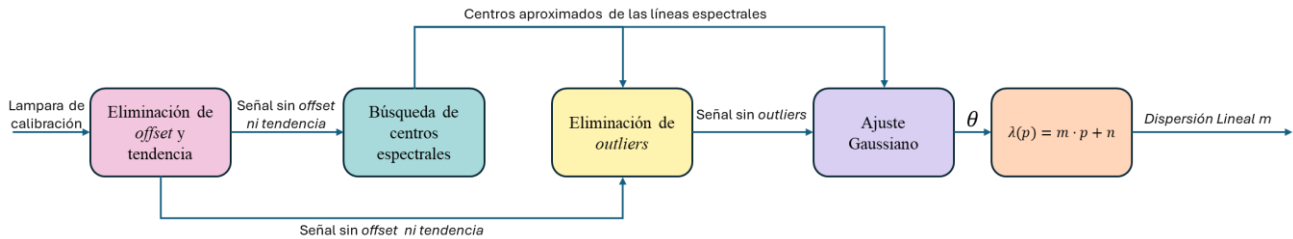


Figura 4.1.2. Diagrama de bloques para la obtención de la dispersión lineal m

4.2 Anchura Instrumental

Otra magnitud determinante en el análisis del plasma de fusión es el ensanchamiento de los datos del espectro, ya sea de las impurezas o del gas de trabajo. Por ello, resulta fundamental tener en cuenta que el sistema de análisis espectral introduce un ensanchamiento adicional que debe ser corregido antes de poder interpretar correctamente la anchura total del experimento. Para el ensanchamiento propio del espectro se hace uso de la FWHM, que como se vio en [el apartado 3.3](#) se obtiene partiendo de la desviación estándar σ .

$$\text{FWHM} = 2\sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma \approx 2.355 \cdot \sigma$$

Para esto se emplean lámparas de tipo *pen* que emiten líneas espectrales muy estrechas y bien definidas en la literatura [15], como se puede observar en la Figura 4.2.1.

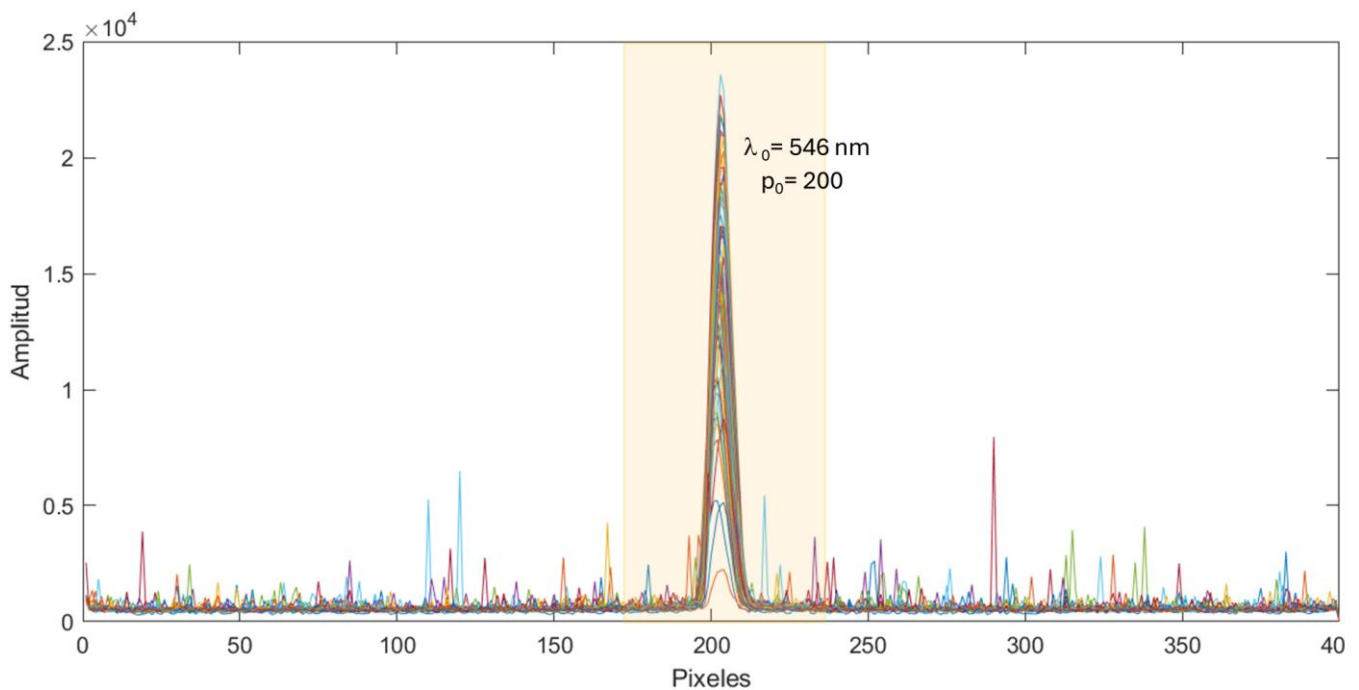


Figura 4.2.1. Espectros de una lámpara de Hg usada para el cálculo de la anchura instrumental

Estas lámparas son analizadas con el proceso descrito tanto en el [Capítulo 3](#), como en el [apartado anterior](#). Siguiendo el flujo del análisis que se representa en la Figura 4.2.2 se obtienen las desviaciones estándar de todos los perfiles de la lámpara de calibración.

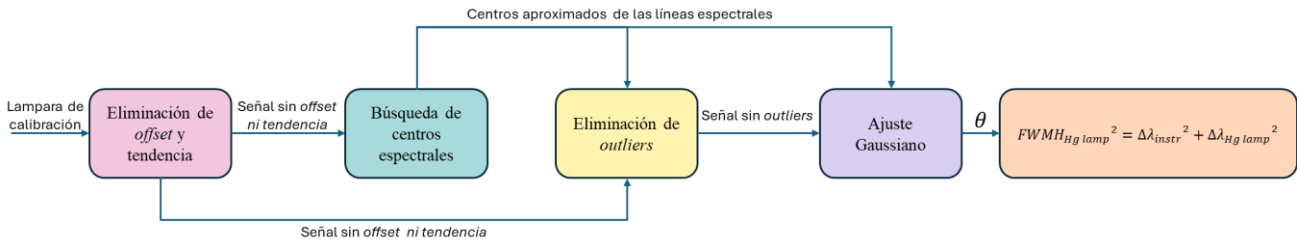


Figura 4.2.2 Diagrama de bloques para la obtención de la anchura a media altura del análisis de una lámpara de mercurio

Se asume que la anchura a media altura de cada uno de los 72 perfiles de la lámpara de calibración corresponde a la anchura instrumental propia del espectrómetro puesto que la lámpara de mercurio emite líneas extremadamente estrechas, por lo que se considera que tiene un ancho intrínseco despreciable frente a la resolución del sistema, por lo que cualquier ensanchamiento observado se puede atribuir exclusivamente al espectrómetro.

$$FWMH_{Hg\ lamp}^2 \cong \Delta\lambda_{instr}^2$$

$$\Delta\lambda_{instr} \cong FWHM_{Hg\ lamp} = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma_{instr}$$

Este valor será utilizado más adelante para corregir el ensanchamiento observado en las líneas espectrales de los espectros, y así obtener una estimación precisa de la temperatura iónica del plasma. Como se verá más adelante, dicha corrección es imprescindible para evitar la sobreestimación de las magnitudes físicas derivadas del ajuste espectral. Además de la anchura instrumental $\Delta\lambda_{instr}$, también se obtienen todos los parámetros θ_{instr} , de entre los que destacaran el píxel central en cada perfil de las líneas espectrales de calibración $p_{instr,1-72}$.

4.3 Conversión espectral, temperatura iónica y velocidad Doppler

Con la dispersión espectral m , la anchura instrumental $\Delta\lambda_{instr}$ y todos los parámetros θ_{instr} ya caracterizados gracias al proceso de calibración, se dispone de todos los elementos necesarios para transformar los datos de espectrales de un experimento en parámetros físicos cuantificables. Este apartado describe cómo se calcula la temperatura iónica de los elementos, el desplazamiento espectral y la velocidad Doppler del plasma, así como la conversión completa de los perfiles espectrales del dominio de píxeles al dominio físico de longitudes de onda.

A modo ilustrativo se realizará el análisis de una descarga típica de C V, como la que se observa en la Figura 4.3.1.a. En esta descarga se corrige la tendencia lineal, se realiza la eliminación de *offset*, *outliers*, y se ajusta a una función gaussiana cada perfil, obteniendo los correspondientes parámetros θ_{Ex} tal y como se pueden ver en la Figura 4.3.2. Posteriormente, se corregirán los efectos instrumentales.

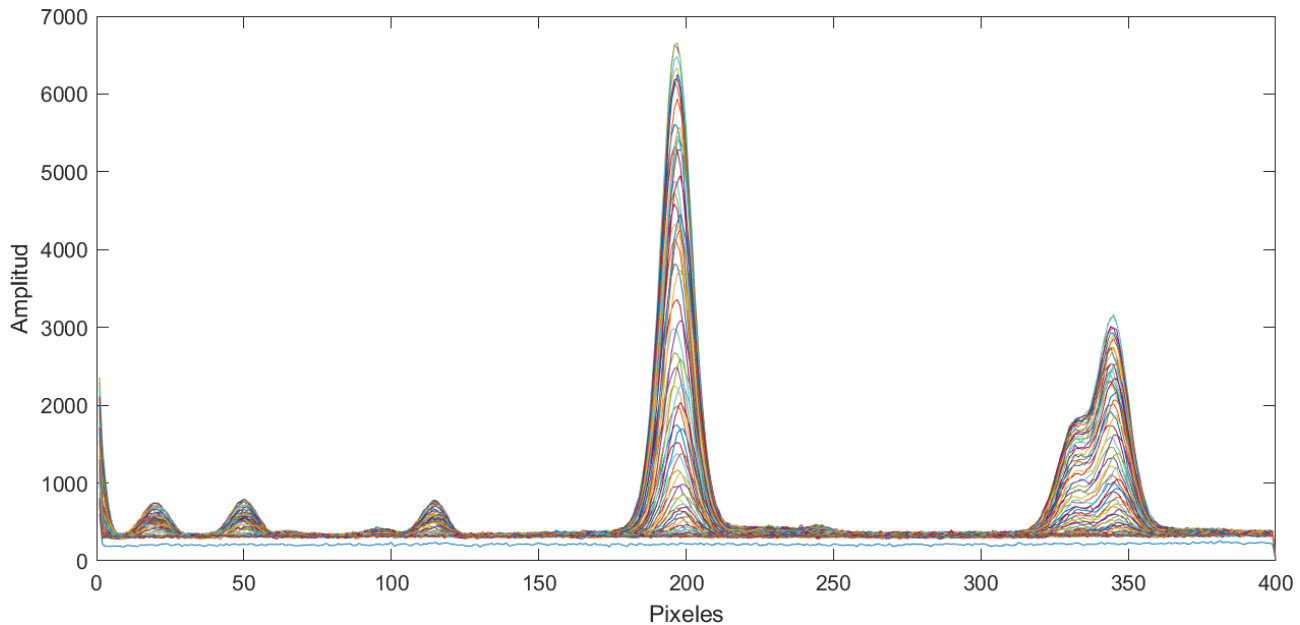


Figura 4.3.1. Ejemplo de líneas espectrales brutas de un experimento con C v como impureza

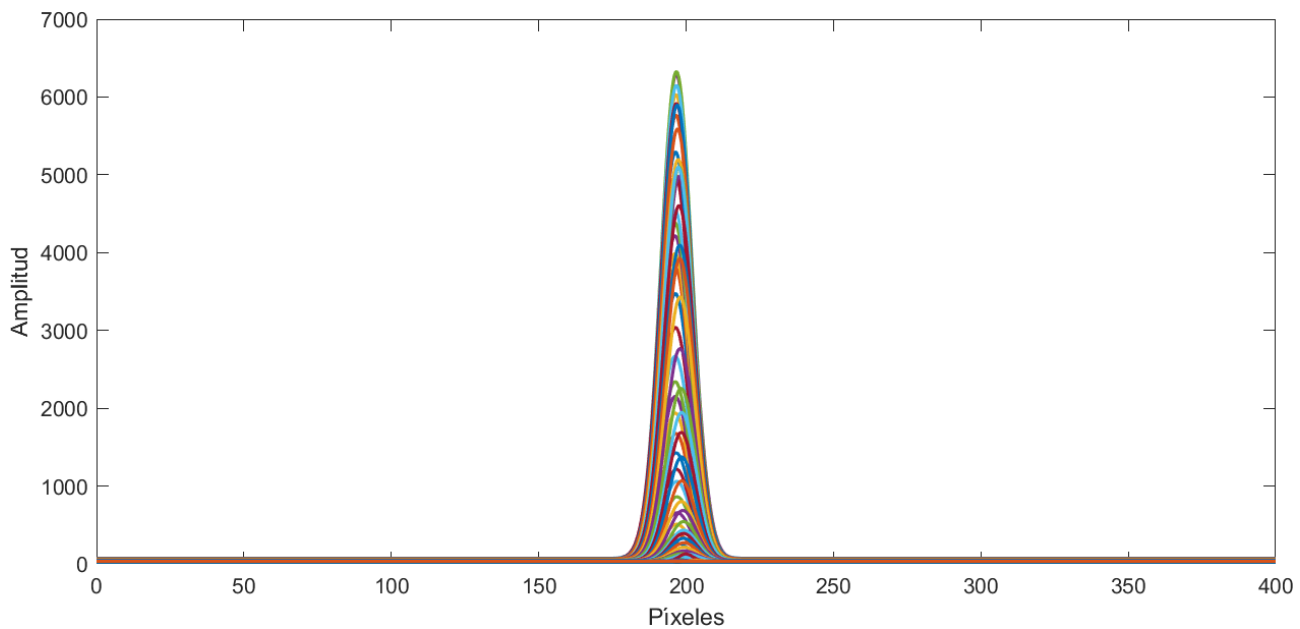


Figura 4.3.2. Ajuste Gaussiano del experimento anterior con C v tras el procesado

Conversión de píxeles a longitud de onda

Para la transformación del eje horizontal del dominio de los píxeles al dominio físico de longitudes de onda será necesario contar con la dispersión lineal m y con los píxeles donde se encuentra centrado el espectrómetro, que serán los píxeles centrales calculados en la calibración del apartado anterior p_{instr} . Adicionalmente, se deberá tener en cuenta el orden de difracción que aparece del hecho de que el sistema es sensible al espectro visible entre 380-760 nm, pero no abarca todo el espectro a la vez, sólo un rango de longitudes de onda estrecho. Esto implica que para algunos elementos se medirá en un orden de difracción (n) distinto del primario, por ejemplo, para el C v, cuya longitud de onda se centra en $\lambda_{Cv} = 227.1 \text{ nm}$, se mide en el tercer orden de difracción $n = 3$ ($\lambda_0 = 227,1 \text{ nm} \times 3 = 681,3 \text{ nm}$). Es por esto por lo que la conversión del eje x para cada píxel se realizará tal que:

$$\Lambda(p) = \frac{\lambda_0 + (p - p_{instr}) \cdot m}{n}$$

siendo λ_0 la longitud de onda de referencia.

Aplicando esta transformación sobre cada perfil y píxel del experimento, se obtiene la señal espectral ya representada en función de la longitud de onda, como puede observarse en la Figura 4.3.3.

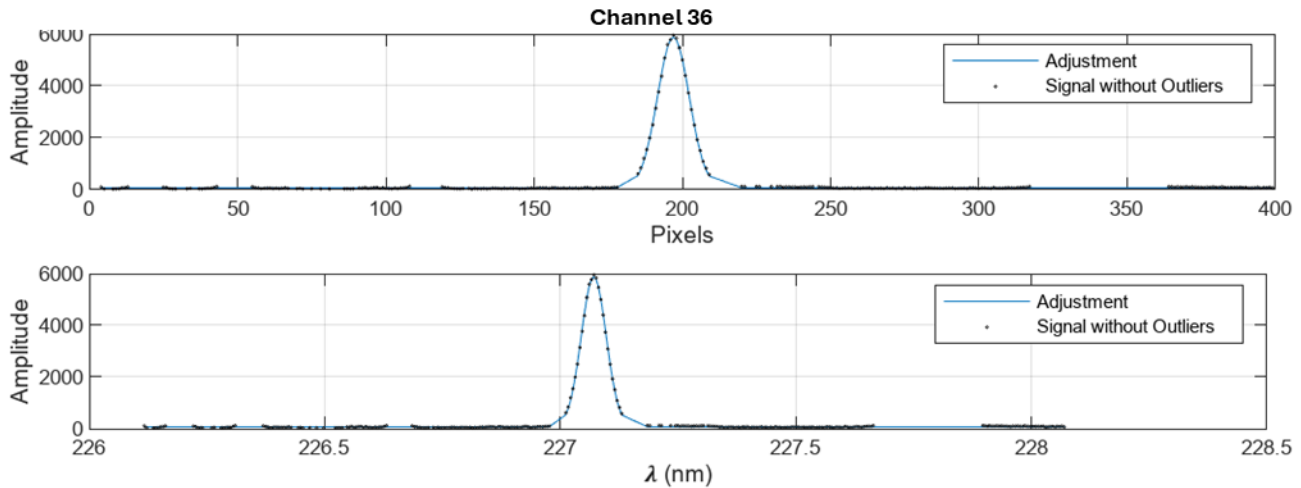


Figura 4.3.3 Comparativa de las líneas espectrales de C v en el dominio de los píxeles y de las longitudes de onda

Cálculo de la temperatura iónica

Como se adelantó en el apartado 4.2, sobre el ensanchamiento instrumental, para cada perfil del experimento se calcula la FWHM tal que:

$$FWHM_{Ex} = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma_{instr}$$

Esta anchura a media altura experimental, $FWHM_{Ex}$, es el resultado de la convolución del ensanchamiento instrumental, $\Delta\lambda_{instr}$ más el ensanchamiento propio de elemento debido al efecto Doppler, $\Delta\lambda_{Cv}$ C V:

$$FWHM_{Ex} = \Delta\lambda_{instr}^2 + \Delta\lambda_{Cv}^2$$

Por tanto, se puede obtener $\Delta\lambda_{Cv}$:

$$\Delta\lambda_{Cv}^2 = FWHM_{Ex} - \Delta\lambda_{instr}^2$$

Este último parámetro se relaciona de forma directa la temperatura iónica, $T_{i,Cv}$ [16] [17] :

$$T_{i,Cv} = 1.68 \cdot 10^8 \cdot M \cdot \left(\frac{\Delta\lambda_{Cv}}{\lambda_0}\right)^2 [eV]$$

Siendo M la masa del ion del experimento en unidades de masa atómica, y λ_0 la longitud de onda del elemento C V. Obteniendo, finalmente, la $T_{i,Cv}$ para cada perfil.

Para garantizar la fiabilidad en los resultados de temperatura se comprobará el coeficiente de determinación R^2 , explicado en el [apartado 3.4](#), formula 3.4.4. Así si el ajuste gaussiano realizado para los perfiles, tanto del fichero de calibración de la anchura instrumental, como el realizado para el experimento, no superan un umbral, típicamente del 0.8, no se calculará su temperatura iónica. Para completar el análisis se incorporan las barras de error mediante la propagación de errores de las diferentes magnitudes empleadas. La Figura 4.3.4. muestra el perfil de temperaturas obtenido para una descarga mediante este proceso.

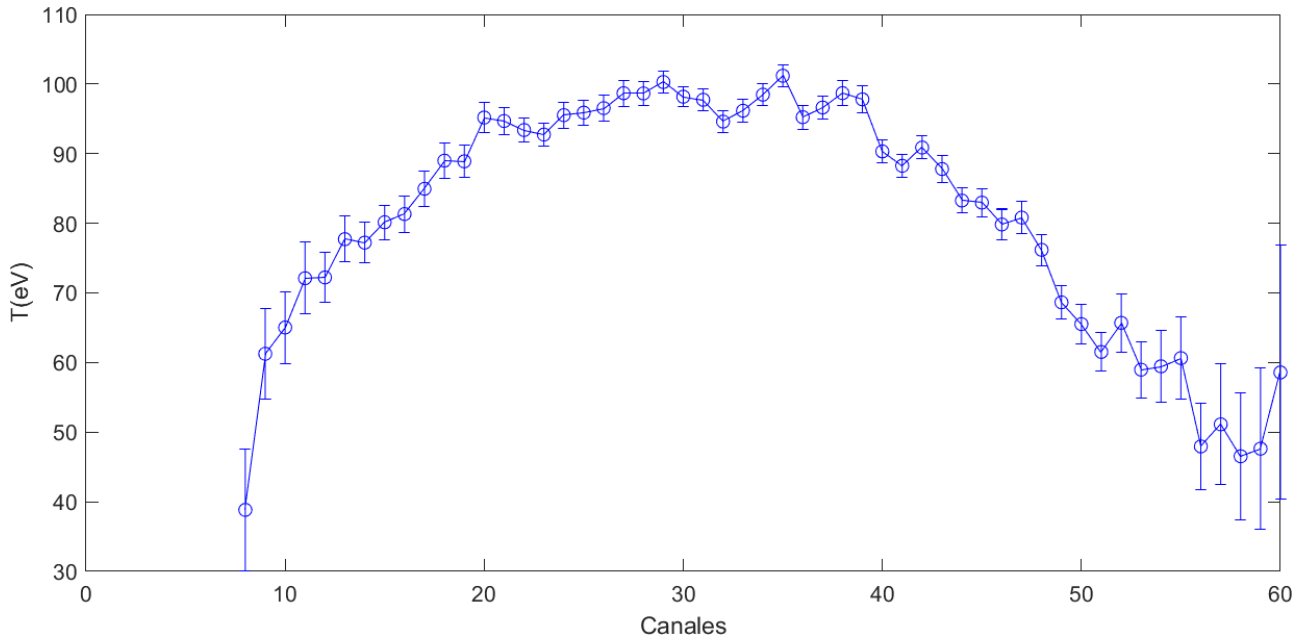


Figura 4.3.4 Temperatura iónica de los distintos perfiles de un experimento con impurezas de C v, con sus correspondientes barras de error

Cálculo del desplazamiento espectral y velocidad Doppler

Observando la Figura 4.3.3, se aprecia que, aunque el espectrómetro esté centrado en la longitud de onda de $\lambda_{Cv} = 227.1nm$ el centro del perfil no coincide exactamente con ese valor a pesar de que se ha realizado el calibrado correcto para la corrección de la dispersión lineal. Esto se debe a que los elementos del experimento poseen cierta velocidad debida al efecto Doppler que genera un corrimiento en frecuencia y por tanto en longitud de onda. Este desplazamiento en longitud de onda conocido técnicamente en espectroscopia como *shift*, puede utilizarse para estimar la velocidad del elemento objeto de estudio.

El primer paso del proceso será calcular este *shift*, entre los centros de las líneas espectrales de calibración corregidos con el decaje del espectrómetro y los datos experimentales.

De igual forma que con la temperatura iónica este cálculo se repite para cada perfil con una R^2 por encima del umbral que se considera como un buen ajuste, en el ejemplo se volverá a usar 0.8.

Una vez determinado el desplazamiento en longitud de onda, la velocidad Doppler proyectada sobre la línea de visión se calcula usando la siguiente expresión:

$$v_{Doppler} = \frac{shift}{\lambda_0} c \text{ [m/s]}$$

donde:

- c la velocidad de la luz
- λ_0 es la longitud de onda del elemento analizado

Este cálculo se repite para todos los perfiles válidos, generando un perfil de velocidades de rotación que se representa en la Figura 4.3.5.

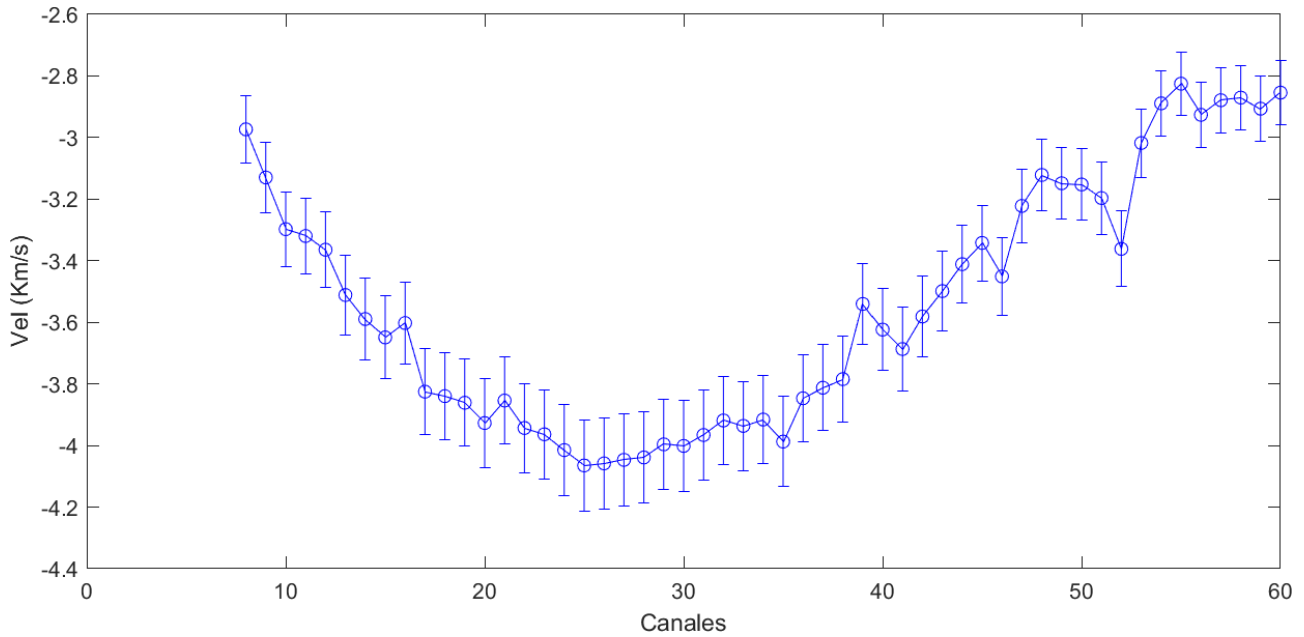


Figura 4.3.5 Velocidad Doppler de los distintos perfiles del elemento C v

Con el cálculo de los parámetros físicos se cerraría todo el proceso de automatización del análisis de los datos espectrales. Pero para completar la herramienta, se ha incorporado la funcionalidad de hacer búsquedas selectivas de descargas que verifiquen criterios de búsqueda muy generales mediante combinaciones “y”, “o” y rangos específicos, por ejemplo, configuraciones magnéticas, tipos de calentamiento, gas de trabajo, impureza y rangos de densidad. Todos los posibles parámetros de búsqueda aparecen en la Tabla 5.2.1 de la [sección 5.2](#)

Capítulo 5 Resultados

Tras establecer el análisis matemático, el desarrollo algorítmico y los fundamentos espectroscópicos necesarios para el análisis de los espectros, el siguiente paso lógico ha sido la integración de dichos resultados y métodos en una herramienta. Como resultado se ha desarrollado una aplicación funcional, rápida, intuitiva, compilable y fácilmente distribuible entre los investigadores del Laboratorio Nacional de Fusión.

Esta aplicación no sólo implementa de forma automatizada todo lo expuesto a lo largo de este trabajo, sino que constituye en sí misma una plataforma de análisis espectroscópico, gracias a la inclusión de una base de datos interna plenamente funcional que permite gestionar y consultar resultados de forma eficiente.

En este capítulo se detalla la integración de los distintos módulos desarrollados, la estructura de la base de datos asociada y las funcionalidades que permiten realizar el análisis y la visualización de los datos. Cabe señalar que este capítulo no tiene como objetivo ser una guía de instalación o de uso de la aplicación, aspectos que se encuentran detallados en el [Anexo A](#) y el [Anexo B](#) respectivamente, sino que pretende presentar la integración práctica y funcional de los conceptos tratados a lo largo de este trabajo de fin de máster de manera ilustrativa.

5.1 Aplicación ITA

El nombre dado a la aplicación es ITA, acrónimo de “*Ion Temperature Analyzer*”. Su implementación ha sido llevada a cabo utilizando MATLAB App Designer, lo que ha permitido hacer uso de forma combinada de la capacidad computacional de MATLAB y de una interfaz gráfica interactiva.

La herramienta se estructura en módulos independientes pero interconectados destacando:

- **Importación y visualización de ficheros:** Permite al usuario cargar ficheros (.spe) tanto con información espectral de ficheros de calibración como ficheros experimentales a través de las pestañas que pueden observarse en la Figura 5.1.1 y la Figura 5.1.2. La importación de las carpetas facilita el análisis al investigador puesto que permite introducir en bloque espectros de descargas de similares características para llevar a cabo el estudio pertinente, añadir datos importantes para dicho análisis como la configuración magnética del plasma en el momento del experimento, el estado de la pared, el tipo de calentamiento, la potencia de los girotrones y de los inyectores de haces neutros y la fecha del experimento, entre otros datos relevantes de importancia para la interpretación física posterior de los resultados obtenidos. Posteriormente se explicará ([epígrafe 5.2](#)) el desarrollo específico implementado para facilitar este análisis al experimentador. Así mismo, la visualización de los espectros puede llevarse a cabo de manera global o acotarse mediante la implementación de una barra de selección.

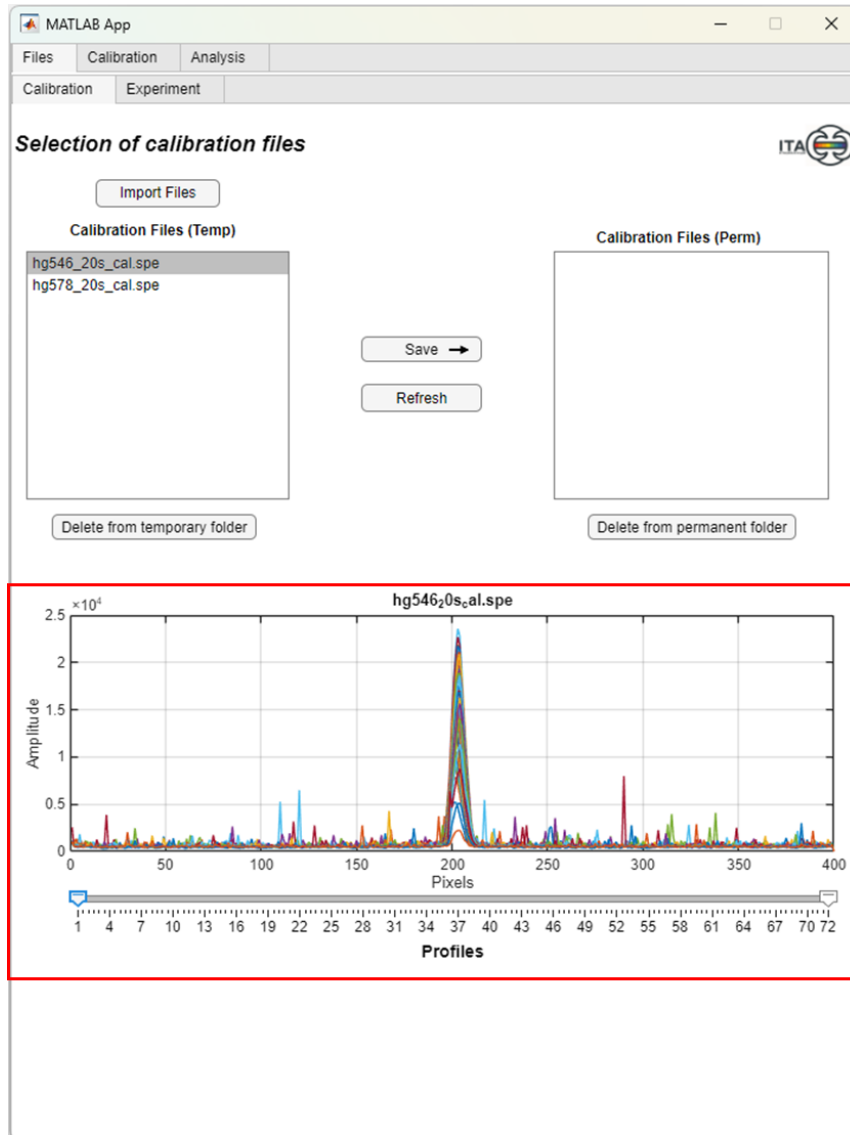


Figura 5.1.1. Pestaña de carga y visualización de ficheros de calibración. En este ejemplo, con una lámpara de mercurio centrada en 546 nm (rectángulo rojo)

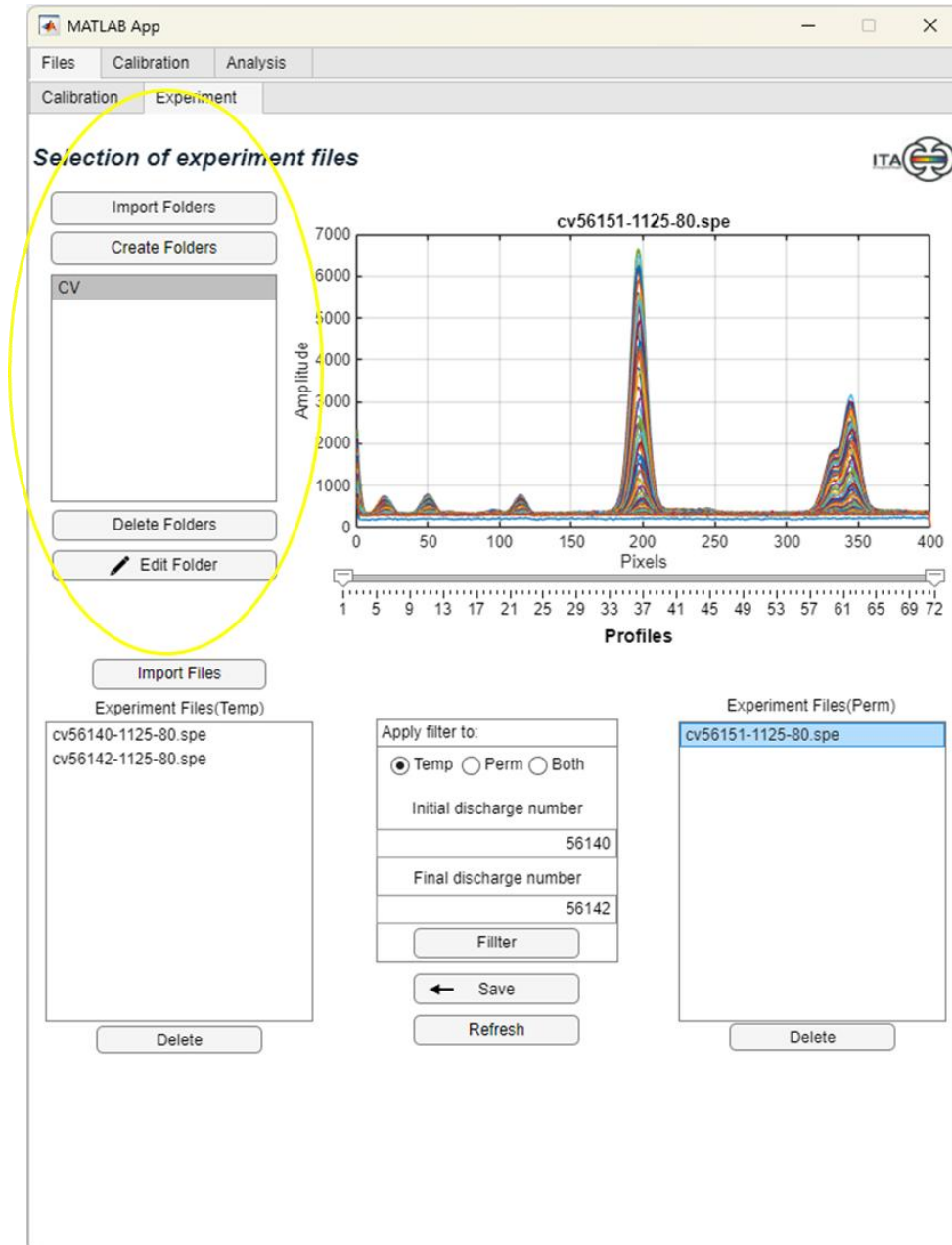


Figura 5.1.2. Pestaña de carga y visualización de carpetas con ficheros que contienen datos experimentales (enmarcado en amarillo). En el ejemplo, para la descarga #56151, adquirida en la fase NBI (en 1125 ms) con un tiempo de adquisición de 80 ms. La información del contenido de la carpeta permitirá crear la base de datos relacional para el análisis posterior

- **Automatización del preprocesado y ajuste gaussiano de calibración:** A partir de los ficheros cargados y seleccionados, se ejecuta de forma automática la corrección de la tendencia, la eliminación del *offset*, la eliminación de *outliers* y el ajuste gaussiano de los 72 espectros. Además, extrae los parámetros de calibración y los refleja en una tabla para que el usuario pueda confirmar que son correctos. Estas funcionalidades se aplican en las pestañas representadas en la Figura 5.1.3 y la Figura 5.1.4.

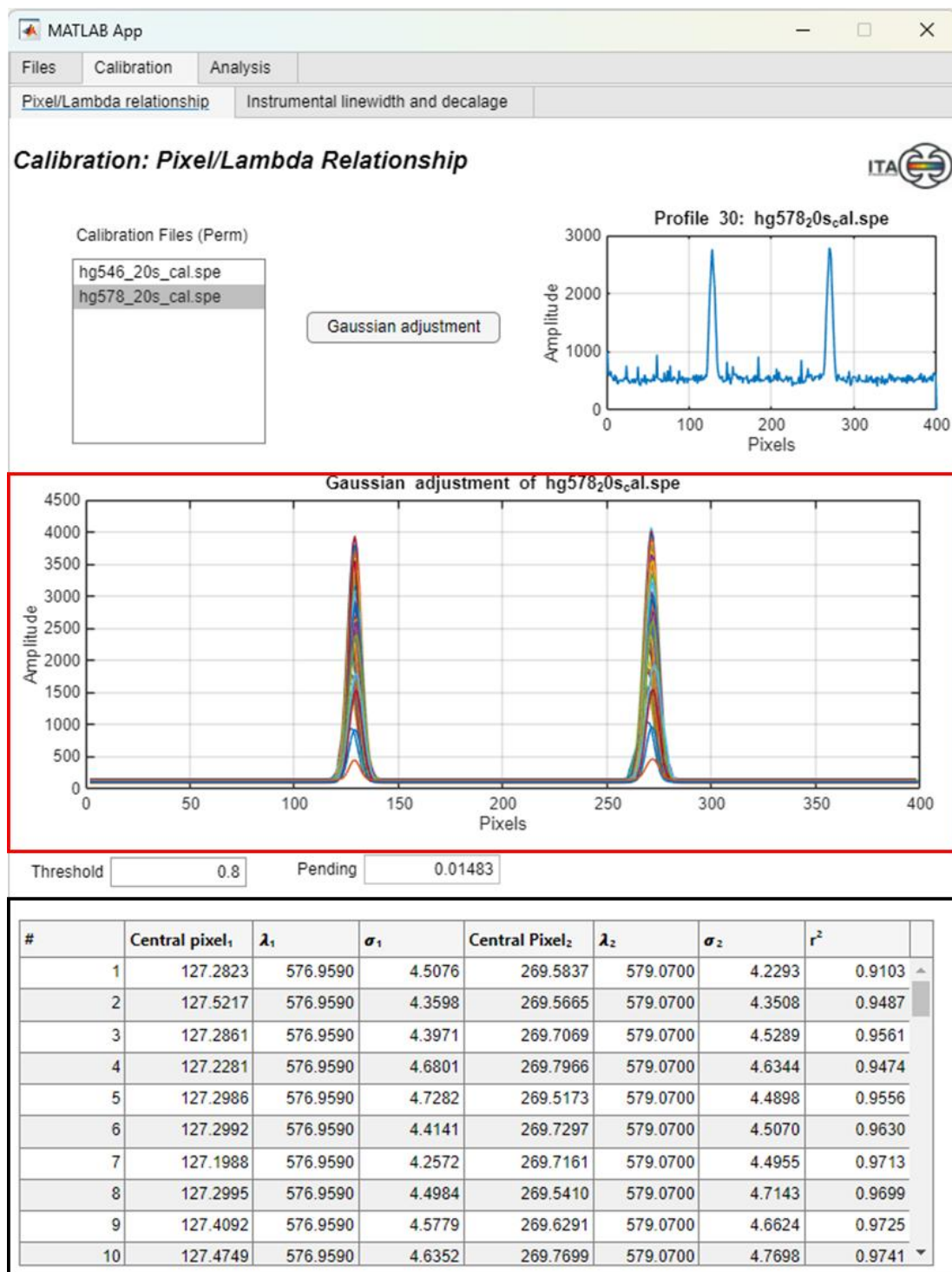


Figura 5.1.3. Pestaña de preprocesado y ajuste gaussiano de los ficheros de calibración para obtener la dispersión lineal del instrumento. En el ejemplo se emplea una lámpara de calibración de Hg (rectángulo rojo) con dos líneas espectrales bien definidas centradas en 576.959 y 579.07 nm. Los resultados de la calibración se muestran en la tabla adjunta (rectángulo negro)

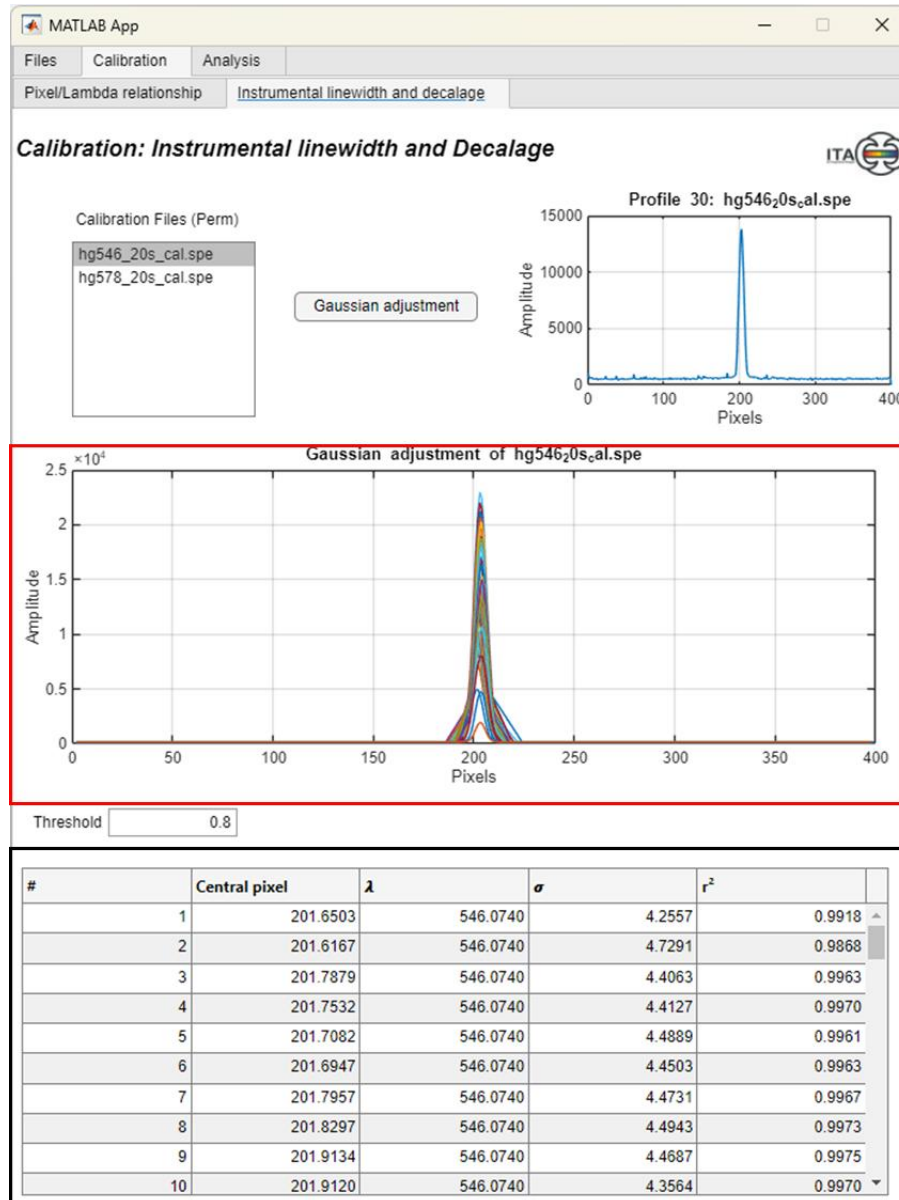


Figura 5.1.4. Pestaña de preprocesado y ajuste gaussiano de los ficheros de calibración para determinar la anchura instrumental. En el ejemplo, se emplea una lámpara de calibración de Hg (rectángulo rojo) con una línea intensa y bien definida centrada en 546.074 nm. Además, los parámetros resultantes del ajuste se almacenan en una tabla para que el experimentador pueda cotejar los resultados (rectángulo negro)

- Almacenamiento de información física, preprocesado, ajuste gaussiano y cálculo de parámetros físicos experimentales:** Del fichero de datos experimentales seleccionado se añade la información que se especifica en la Tabla 5.2.1 del apartado 5.2. Además, realiza el preprocesado completo mencionado anteriormente, se realiza el ajuste gaussiano y haciendo uso de los datos de calibración realiza y representa gráficamente la temperatura iónica, el shift y la velocidad Doppler. Todo el proceso queda sintetizado en una pestaña tal y como se muestra en la Figura 5.1.5. Para completar el análisis la aplicación ofrece visualizaciones adicionales sobre el ajuste gaussiano como son el *background*, la amplitud, el R^2 , el desviación estándar y la anchura a media altura (ver Figura 5.1.6).

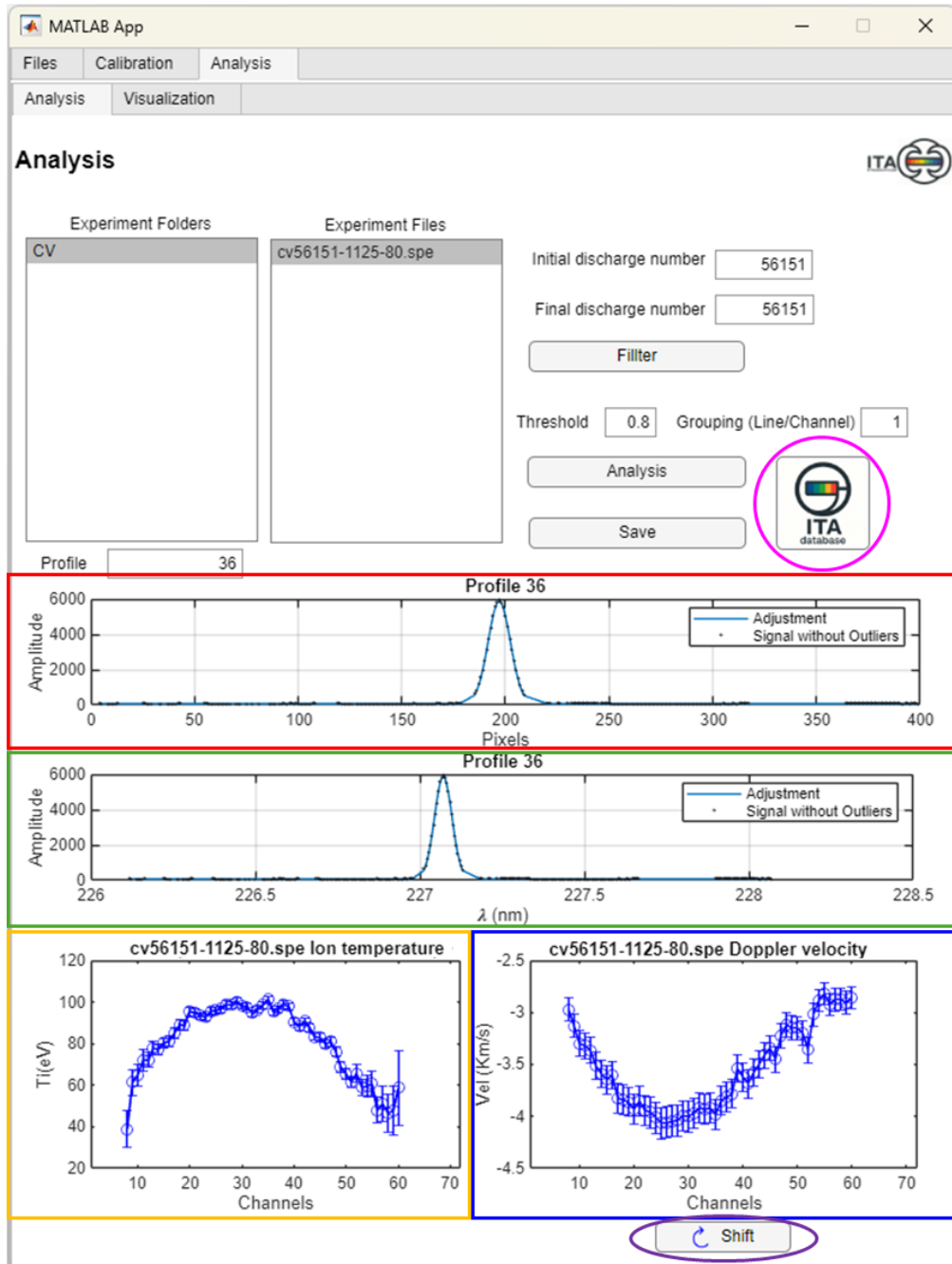


Figura 5.1.5. Pestaña de procesamiento y visualización de espectros de una descarga de C v. En el ejemplo, se muestra la descarga #56151. Se representa el canal 36 de los 72 adquiridos tanto en píxeles (rectángulo rojo) como en longitudes de onda (rectángulo verde) . Así mismo, aparecen representados los perfiles de T_i (rectángulo amarillo) y la velocidad Doppler (rectángulo azul) con sus correspondientes barras de error. El botón marcado en violeta permite cambiar la visualización de velocidad Doppler a *shift* y viceversa. Finalmente, el círculo magenta enmarca la tecla que permite cambiar a la pantalla de la base de datos relacional para el análisis posterior.

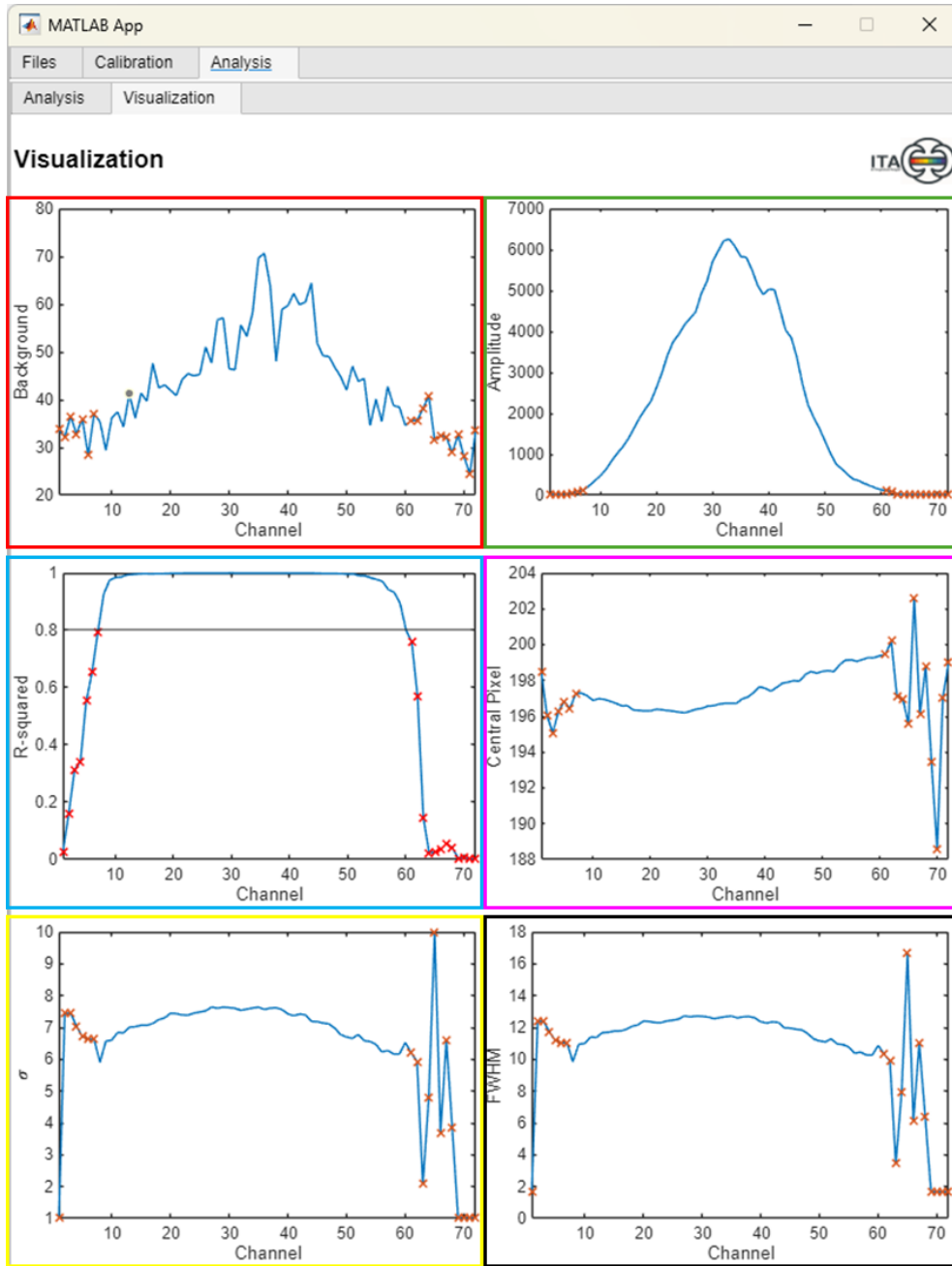


Figura 5.1.6. Pestaña de visualización de información sobre el ajuste gaussiano. En la figura se muestran, para cada canal, los principales parámetros del ajuste: el *background* (rectángulo rojo), la amplitud (rectángulo verde), el coeficiente de determinación R^2 (rectángulo azul celeste), el píxel central (rectángulo magenta), la desviación estándar (rectángulo amarillo) y la FWHM (rectángulo negro). Los canales cuyo R^2 es inferior al umbral preestablecido se marcan con cruces rojas para facilitar su identificación.

5.2 Base de datos de la aplicación ITA

Para mejorar las prestaciones ofrecidas por la aplicación ITA y dotarla de mayor funcionalidad y utilidad se ha desarrollado una base de datos que permite almacenar y organizar de forma eficiente la información generada tras el análisis experimental. Esta base de datos sirve como núcleo para el estudio de resultados pasados, la comparación entre experimentos y la localización rápida de datos importantes.

La base de datos usa como respaldo un fichero Microsoft Access (.accdB), debido a su compatibilidad con MATLAB. Su utilización resulta transparente para el usuario. Emplea varias tablas que conectan y

relacionan la información de todos los procesos que se llevan a cabo en el funcionamiento de la aplicación. Finalmente, sintetiza la información más relevante en una interfaz gráfica en forma de *query* dinámica con la que el usuario puede interactuar, ya sea modificando los valores de los experimentos, añadiendo nota o filtrando resultados. Los campos que aparecen se representan en la Tabla 5.2.1 y se puede interactuar con ellos a través de la interfaz mostrada en la Figura 5.2.1.

Tabla 5.2.1 Campos de la *query* dinámica

Campo	Tipo de dato
Identificador	Numérico
Número de descarga	Numérico
Elemento	Texto
Grupo de análisis	Texto
Tiempo de inicio	Numérico
Ventana de adquisición	Numérico
Configuración magnética	Texto
Potencia ECRH1 (kW)	Numérico
Potencia ECRH2 (kW)	Numérico
En eje / Fuera de eje	Texto
Potencia NBI1 (kW)	Numérico
Potencia NBI2 (kW)	Numérico
Densidad electrónica (10^{19} m^{-3})	Numérico
Gas de trabajo	Texto
Longitud de onda real (nm)	Numérico
Longitud de onda sintonizada en el espectrómetro (nm)	Numérico
Orden de difracción	Numérico
Temperatura iónica central (Ti)	Numérico
Lámpara de calibración de píxeles (longitud de onda)	Texto
Lámpara de desplazamiento y anchura espectral	Texto
Descripción del experimento	Texto
Comentarios adicionales	Texto
Velocidad Doppler (si aplica)	Numérico
Fecha del experimento	Texto
Fecha de litiado	Texto
Fecha de boronización	Texto
Campo reservado 1	Texto
Campo reservado 2	Texto
Campo reservado 3	Texto
Campo reservado 4	Texto

The image shows the ITA database interface. At the top left is the ITA logo. Below it are 'Apply' and 'Delete' buttons. The main area is a data table with columns for various parameters. Above the table, there are multiple 'Select' dropdown menus for filtering data. The table columns include: ID, ShotNumber, Element, AnalysisGroup, StartTime, IntegrationWind, MagneticConfig, ECRH1 kW, ECRH2 kW, OnOffAxis, NB1 kW, NB2 kW, ElectronDens, WorkingGas, RealLambda, TunedLambda, DiffractionOrder, CentralT, PixelLambdaCal, SHFAndWidBla, ExperimentDesc, AdditionalComm, Rotation, ExperimentDate, LithationDate, BoronizationDate, and Placeholder1 through Placeholder5. The table contains numerous rows of data, with the first few rows showing values for parameters like ShotNumber (e.g., 16, 17, 18), Element (e.g., He, Ne, Ar), and StartTime (e.g., 1121, 1122, 1123).

Figura 5.2.1. Interfaz gráfica de la base de datos ITA.

Este conjunto de funcionalidades convierte a ITA en una plataforma versátil para el análisis espectroscópico en entornos de investigación. La automatización del procesamiento, el cálculo físico y la organización de los datos experimentales permite no sólo ahorrar tiempo, sino también mejorar la fiabilidad, la trazabilidad y la utilidad científica de los resultados obtenidos

Capítulo 6 Conclusiones y trabajos futuros

El desarrollo de la aplicación ITA se ha fundamentado en un conocimiento profundo sobre el procesado de datos espectroscópicos que permitiese la creación y desarrollo de un código MATLAB. Este código debía replicar de forma eficiente y rápida todas las necesidades del análisis, desde la importación de los espectros en formato .spe y, su lectura, hasta la obtención de los parámetros físicos a interpretar por el investigador, pasando por etapas previas de preprocesado y calibración, necesarios para la correcta interpretación de los resultados. Además, para la consecución de dichos objetivos ha sido necesario aprender conceptos de física de plasmas de fusión y conceptos básicos de espectroscopia Doppler para comprender tanto el contexto donde se va a utilizar la herramienta (un dispositivo de fusión complejo con un amplio volumen de datos), como el proceso de tratamiento de los datos experimentales. Este aprendizaje ha sido esencial para la correcta manipulación e integración de los parámetros físicos que devuelve el programa.

El resultado de este trabajo de fin de máster ha dado lugar a una solución técnica que permite sustituir el procedimiento actual, casi manual y poco escalable, por una herramienta compilable sin necesidad de software externo, útil, rápida y eficaz diseñada a medida de las necesidades del entorno de investigación en plasmas de fusión nuclear.

El trabajo desarrollado en este Trabajo de Fin de Máster será presentado en dos conferencias internacionales de relevancia en el ámbito de la física de plasmas:

51st EPS Conference on Plasma Physics

- **Fechas:** 7–11 de julio de 2025
- **Lugar:** Vilna, Lituania
- **Título de la contribución:** *Upgrade of the TJ-II passive-spectroscopy system to improve estimations of carbon ion temperatures*
- **Autores:** B. López-Miranda¹, D. Amador², J. Vega¹, S. Dormido-Canto³, A. Baciero¹, Á. Cappa¹, K. J. McCarthy¹, J. de la Riva¹ y el equipo TJ-II
- **Afiliaciones:**
 - ¹ Laboratorio Nacional de Fusión, CIEMAT, España
 - ² Departamento de Arquitectura de Computadores y Automática, UCM, España
 - ³ Departamento de Informática y Automática, UNED, España

Plasma 2025 – International Conference on Research and Application of Plasmas

- **Fechas:** 15–19 de septiembre de 2025
- **Lugar:** Varsovia, Polonia
- **Título de la contribución:** *Recognition of two patterns of ion-temperature profiles in the TJ-II stellarator after the upgrade of a multichannel spectrometer*
- **Autores:** B. López-Miranda¹, L. López-Sánchez², D. Amador², J. Vega¹, S. Dormido-Canto³, A. Baciero¹, I. Pastor¹ y el equipo TJ-II
- **Afiliaciones:**
 - ¹ Laboratorio Nacional de Fusión, CIEMAT, España
 - ² Departamento de Arquitectura de Computadores y Automática, UCM, España
 - ³ Departamento de Informática y Automática, UNED, España

Como parte de los trabajos futuros asociados a esta herramienta, se ha desarrollado durante la redacción de esta memoria, un código denominado TJ2_Cuerdas_General, destinado a ser implementado en la aplicación para dotarla de capacidad geométrica avanzada. Esta función incorpora la geometría de la cámara de vacío del TJ-II y de sus superficies magnéticas, lo que permite asignar una correspondencia entre las cuerdas de visión del espectrómetro (véase la Figura 2.3.1) y los radios del plasma teniendo en cuenta las diferentes configuraciones magnéticas, esto es, las diferentes “formas del plasma” y las coordenadas absolutas del espectrómetro en relación a la máquina TJ-II. Posteriormente, también se podría comparar con un perfil simulado de la temperatura iónica en el plasma, a partir de integrales de línea calculadas para las trayectorias de las cuerdas de visión.

La actualización de ITA se puede dividir en tres bloques principales:

- **Validación de la geometría:** se carga un fichero NetCDF con los datos geométricos del dispositivo, utilizando la librería geom3d desarrollada en el CIEMAT [16]. con los datos de las distintas configuraciones magnéticas del dispositivo. Se consideran los ficheros correspondientes al ángulo toroidal de la máquina donde se ubica el sistema espectroscópico. Se genera una malla a partir de las variables contenidas en el fichero para representar las superficies magnéticas. Con la función `contourf` se dibujan contornos coloreados de la variable que representa la coordenada normalizada del flujo magnético. Se representan elementos estructurales importantes teniendo en cuenta las coordenadas radiales de los mismos. Esto permite visualizar las superficies magnéticas anidadas del plasma, el campo magnético, junto con los contornos de la cámara de vacío, el eje magnético y otros elementos relevantes.
- **Definición de las líneas de visión para el cálculo de los radios de plasma:** utilizando la geometría definida, se referencia el sistema espectroscópico en coordenadas de máquina, acotando las dimensiones de la ventana de observación, las distancias a la lente focalizadora, a la rendija del espectrómetro y, en combinación con los parámetros ópticos (diámetro, espesor, posición relativa, etc.) se trazan múltiples líneas de visión que parten desde diferentes puntos del plasma y alcanzan la rendija del sistema óptico. Por cada punto de prueba y para cada uno de los puntos repartidos a lo largo de la pupila de entrada del sistema óptico se determina la ecuación de la recta que une el punto de origen en el plasma y el punto sobre la pupila de entrada. Se calculan los coeficientes de la recta mediante una función auxiliar que devuelve los coeficientes A, B, C de la ecuación implícita de cada cuerda de visión. A continuación, se determina la pendiente y se evalúa si la línea de visión atraviesa la ventana y se propaga su trayectoria hasta el detector. Para cada rayo válido, se almacenan su vector unitario y un punto de la pupila de entrada. A continuación, se grafican estas trayectorias y se guardan los resultados en archivos de salida que serán usados posteriormente en los cálculos.

Este proceso permite determinar las intersecciones de dichas cuerdas de visión con las superficies magnéticas y, posteriormente, calcular las integrales de línea necesarias para, por un lado, asignar a cada cuerda de visión un radio de plasma en cada configuración magnética y, por otro lado, poder evaluar el perfil de temperatura.

- **Visualización de la geometría:** la figura se ajusta para mostrar los ejes en milímetros y se configuran límites adecuados para los diferentes ejes. Finalmente, se guarda la figura, lo que permite contar con una representación visual de la geometría fundamental para la validación y el análisis posterior.

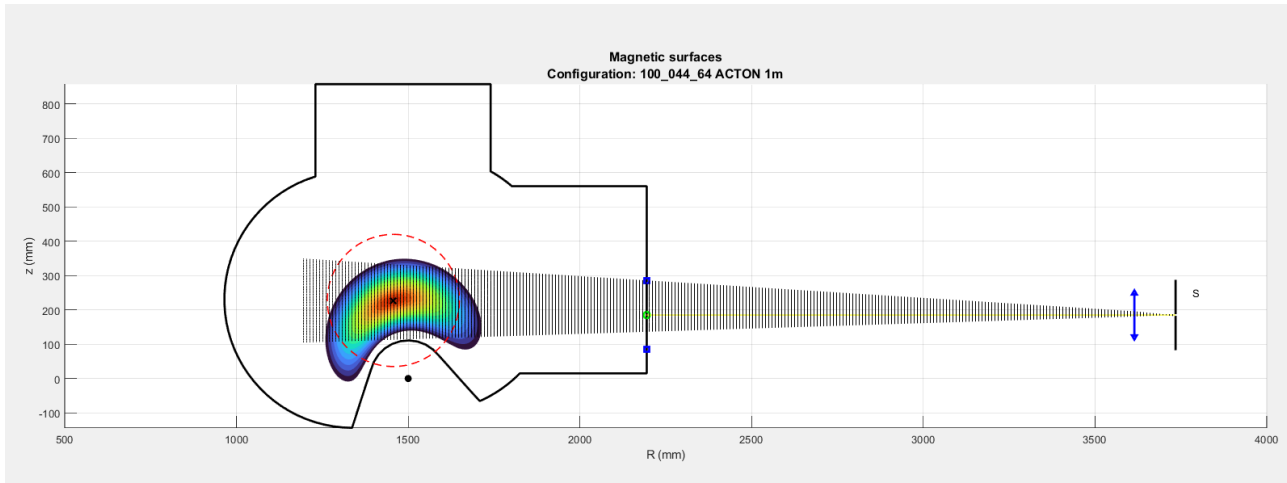


Figura 6.1 Representación geométrica del sistema óptico y las cuerdas de visión utilizadas para determinar las cuerdas de visión y asignar los radios del plasma correspondientes

Esta función constituye un avance significativo en la capacidad de la herramienta, al proporcionar la base geométrica necesaria para asociar los resultados espectroscópicos con coordenadas físicas reales en el plasma. Gracias a ello, será posible no sólo analizar, sino también interpretar los resultados de forma espacialmente coherente, cerrando así el ciclo completo de automatización, desde la señal bruta hasta la comparación física con modelos analíticos.

Además, la adquisición de perfiles de 72 puntos y la facilidad de interrogar a la base de datos relacional mediante la *query* desarrollada posibilitará llevar a cabo agrupamientos no supervisados de perfiles para descubrir diferentes comportamientos físicos en las distintas descargas.

Finalmente, se pretende la implementación en tiempo real de esta herramienta para máquinas de pulso largo como Wendelstein 7-X³, el stellarator de mayor tamaño operativo en la actualidad, lo que permitirá obtener múltiples perfiles de temperatura iónica y velocidad Doppler a lo largo de una sólo descarga. La adquisición y el rápido manejo e interpretación de los datos espectroscópicos grabados en tiempo real permitirá la toma de decisiones y la realimentación automática del sistema de control.

³ Wendelstein 7-X: Dispositivo de fusión de tipo *stellarator*, perteneciente al Instituto Max Planck para la Física del Plasma en Greifswald (Alemania). Operativo desde 2015, en febrero de 2023 se logró por vez primera mantener un plasma durante ocho minutos, con una energía de 1,3 gigajulios [20]

Bibliografía

- [1] F. F. Chen, *An indispensable truth: How fusion power can save the planet*, New York: Springer, 2011.
- [2] J. D. Lawson, «Some criteria for a power producing thermonuclear reactor,» *Proceedings of the Physical Society. Section B*, vol. 70, nº 1, p. 6, 1957.
- [3] J. Sheffield, «The physics of magnetic fusion-reactors,» *Reviews of Modern Physics*, vol. 66, nº 4, p. 1015, 1994.
- [4] I. Y. y. S. A. Tamm, *Theory of a magnetic thermonuclear reactor*, Oxford: Pergamon, 1961.
- [5] L. Spitzer, «The stellarator concept,» *Physics of Fluids*, vol. 1, 1958.
- [6] I. y. U. Ministerio de Ciencia, «Divulgación CIEMAT,» [En línea]. Available: <https://divulgacion.ciemat.es/tjii>.
- [7] A. Baciero, B. Zurro, K. J. McCarthy, C. Burgos y V. Tribaldos, «A multi-channel spectroscopic system for measuring impurity ion temperatures and poloidal rotation velocities in TJ-II,» *Review of Scientific Instruments*, vol. 72, nº 1, p. 971–974, 2001.
- [8] C. Hall, «MATLAB Central File Exchange,» 19 Marzo 2017. [En línea]. Available: <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/35940-readspe>. [Último acceso: 5 Mayo 2025].
- [9] M. Clarke, «SciPy,» [En línea]. Available: http://www.scipy.org/Cookbook/Reading_SPE_files.
- [10] S. B. Wilkins, «Sourceforge,» [En línea]. Available: <https://pyspec.svn.sourceforge.net/svnroot/pyspec/trunk/pyspec/ccd/files.py>.
- [11] N. I. o. Health, «ImageJ,» [En línea]. Available: <http://rsbweb.nih.gov/ij/>.
- [12] S. W. Smith, *The Scientist and Engineer's Guide to Digital Signal Processing*, San Diego: California Technical Publishing, 1997.
- [13] C. B. Moler, *Numerical Computing with MATLAB*, Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), 2004.
- [14] C. F. V. L. Gene H. Golub, *Matrix Computations*, Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013.
- [15] C. J. S. J. M. B. Joseph Reader, «Irradiances of spectral lines in mercury pencil lamps,» *Applied Optics*, vol. 35, nº 1, p. 78–83, 1996.
- [16] M. K. J. B. R. & P. S. J. M., «Charge-exchange spectroscopic diagnostic for the TJ-II stellarator,» *Review of Scientific Instruments*, vol. 77, nº 10, 2006.
- [17] R. J. C. J. M. M. K. J. F. J. M. & P. S. Peláez, «Impurity temperature correction factors for the transmission grating spectrometer in the TJ-II stellarator,» *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 43, nº 14, 2010.
- [18] J. Guasp, «Librería geom3d para manipulación geométrica de la cámara de vacío, el flujo magnético y las superficies magnéticas en las configuraciones de los plasmas de TJ-II en 3 dimensiones,» CIEMAT, Madrid.
- [19] B. Zurro, K. J. McCarthy y otros, «Analysis software for spectroscopic diagnostics in TJ-II,»

CIEMAT, Madrid, 2000.

[20] F. Fleschner, «Max Planck Institute,» 22 02 2023. [En línea]. Available:
https://www.ipp.mpg.de/5322229/01_23.

Anexo A Tutorial de Instalación

Paso 1: Descarga y descompresión

- Descargue el archivo "ITA_Installer.zip" y guárdelo en la ubicación de su preferencia.

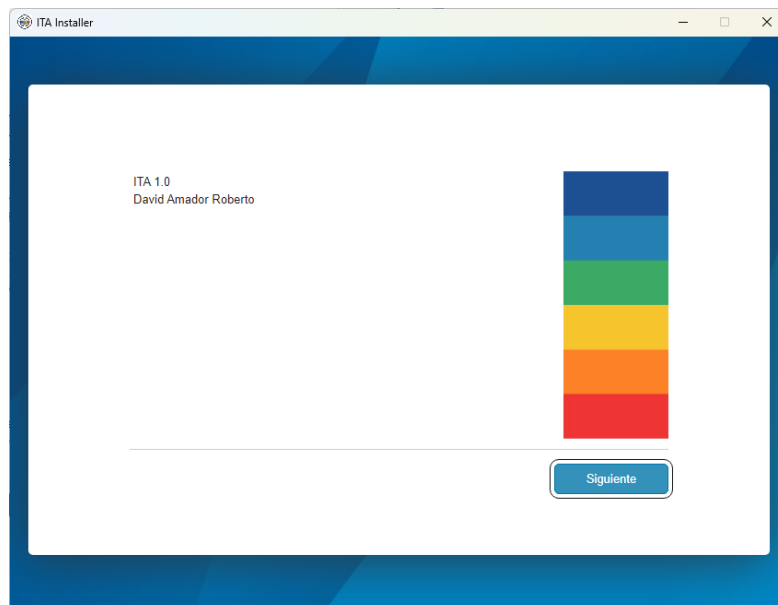
ITA_Installer.zip	23/04/2025 17:01	Carpeta comprimi...	1.383.195 KB
-------------------	------------------	---------------------	--------------

- Descomprima este archivo haciendo clic derecho sobre él y seleccionando "Extraer aquí" o "Extraer en ITA_Installer".
- Tras descomprimir, obtendrá una carpeta llamada "ITA_Installer", que contiene:
 - Una carpeta llamada "DB" (se utilizará más adelante).
 - Esta guía de instalación.
 - El instalador llamado "ITA_Installer.exe"

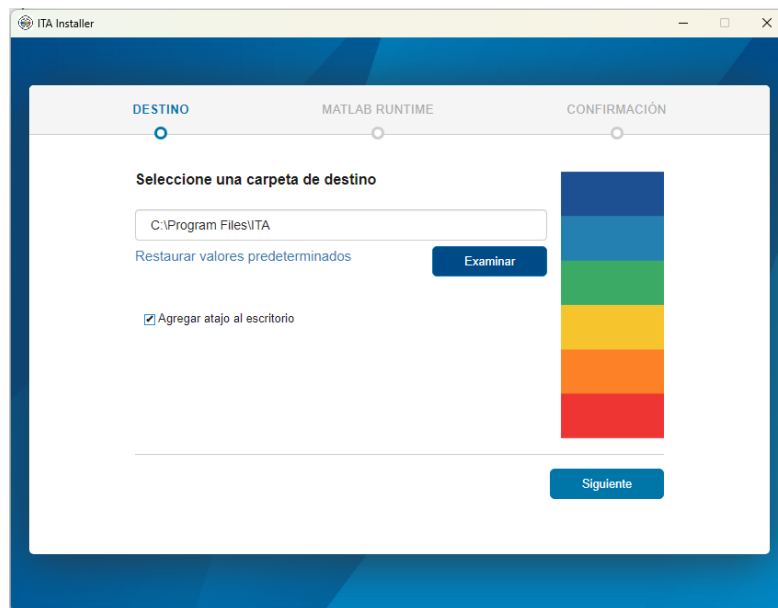
Nombre	Fecha de modificación	Tipo	Tamaño
DB	23/04/2025 17:02	Carpeta de archivos	
Guia de Instalación y de uso.pdf	23/04/2025 16:59	Documento Adob...	2.326 KB
ITA_Installer.exe	23/04/2025 16:57	Aplicación	1.384.932 KB

Paso 2: Instalación del programa

- Haga doble clic en el archivo "ITA_Installer.exe".
- Cuando el sistema le solicite permisos de administrador, haga clic en "Sí" para continuar con la instalación.

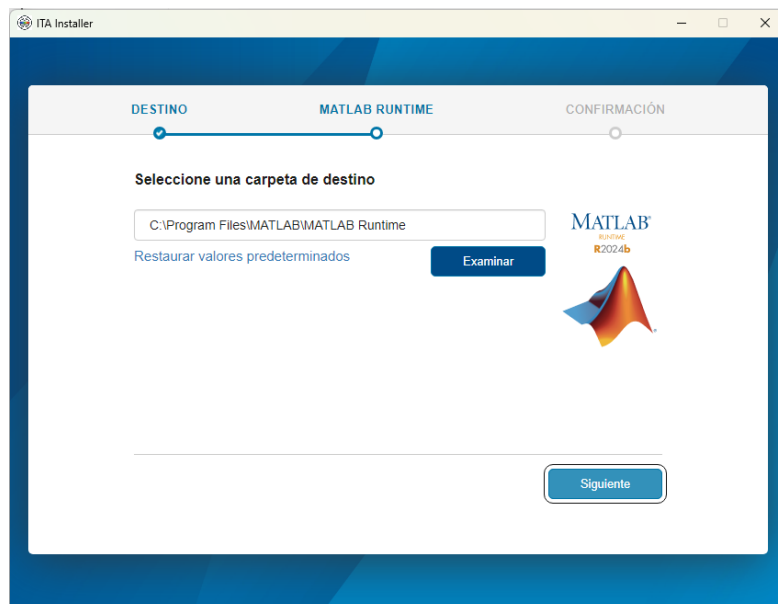


- Durante el proceso, se le pedirá seleccionar una carpeta donde instalar el programa. Por ejemplo, puede usar la ruta predeterminada sugerida:

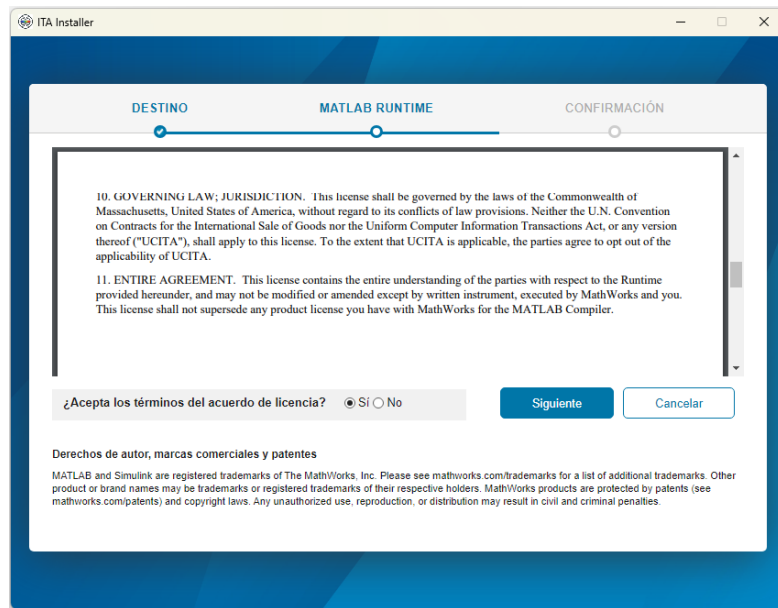


(Se recomienda pulsar la opción “Agregar atajo al escritorio”, si no lo pulsa ahora podrá hacerlo más adelante).

- Una vez elegida la ruta, haga clic en "Siguiente" y en la siguiente página seleccione la ruta en la que desee instalar el *Runtime* de Matlab, en caso de que ya esté instalado este preciso *Runtime* no le aparecerá la siguiente ventana y le saldrá la opción de comenzar la instalación directamente.

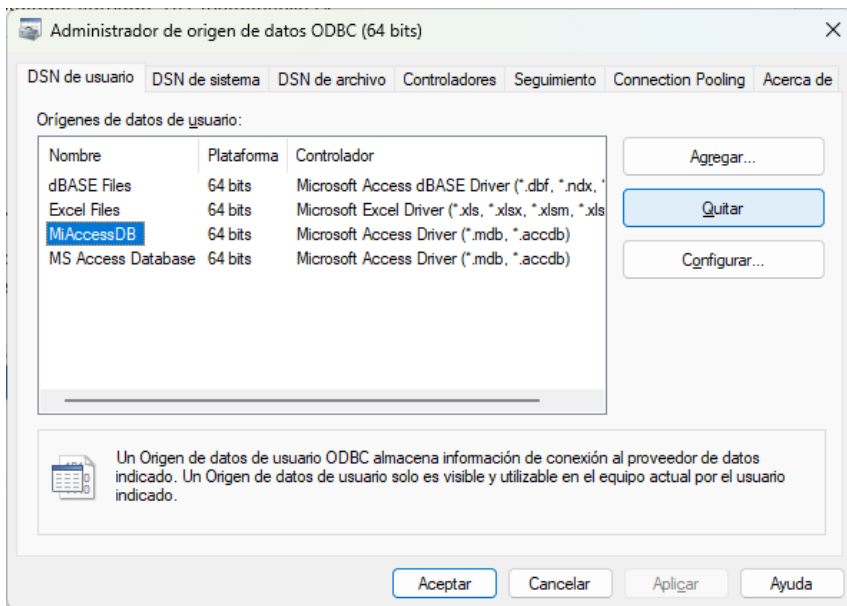


- Tras pulsar el botón “Siguiente” deberá leer y aceptar los términos del acuerdo de licencia, tras lo cual podrá comenzar la instalación.



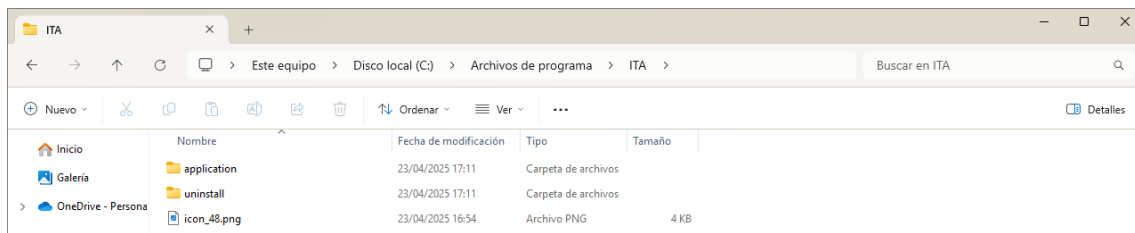
- Espere a que finalice la instalación; recibirá un mensaje indicando que ha sido completada con éxito.

Antes de la primera ejecución pulse la tecla Windows+R y escriba “odbcad32.exe”. Se le abrirá una ventana en la que debe comprobar que no aparezca “MiAccessDB”, en caso de que sí aparezca elimínelo pulsándolo y luego presionando el botón “Quitar”.

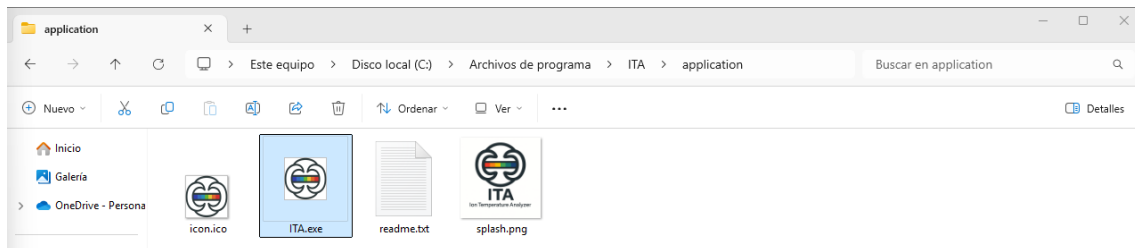


Paso 3: Primera ejecución

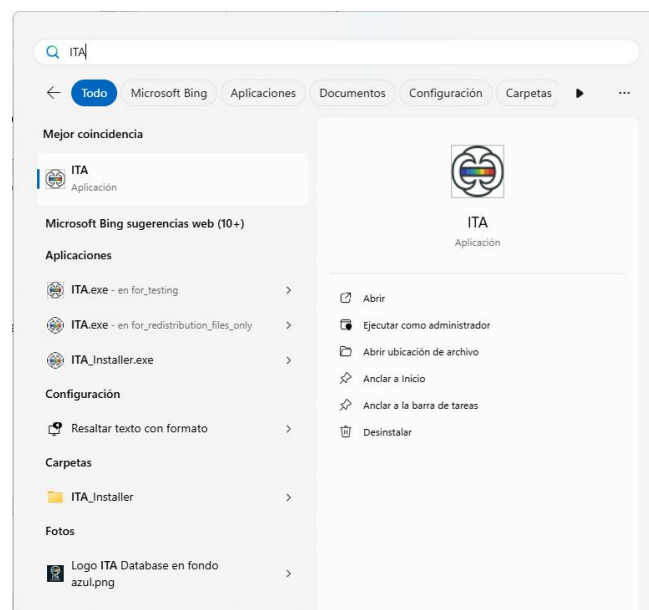
Tras instalar el programa encontrará el ejecutable del mismo, que se encontrará dentro de una carpeta llamada “**application**” que aparecerá en la ruta en la que se descargó el programa. En el caso de haber dejado la ruta predeterminada será “**C:\Program Files\ITA**”.



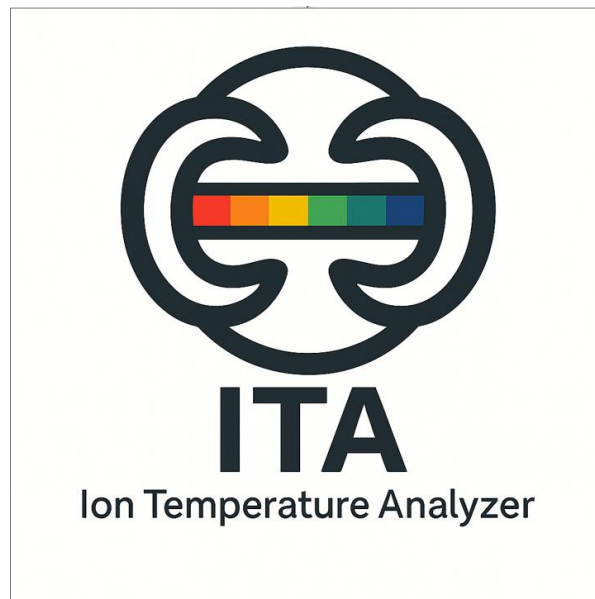
Dentro de la carpeta “**application**” encontrará el archivo “ITA.exe” con el que puede ejecutar el programa:



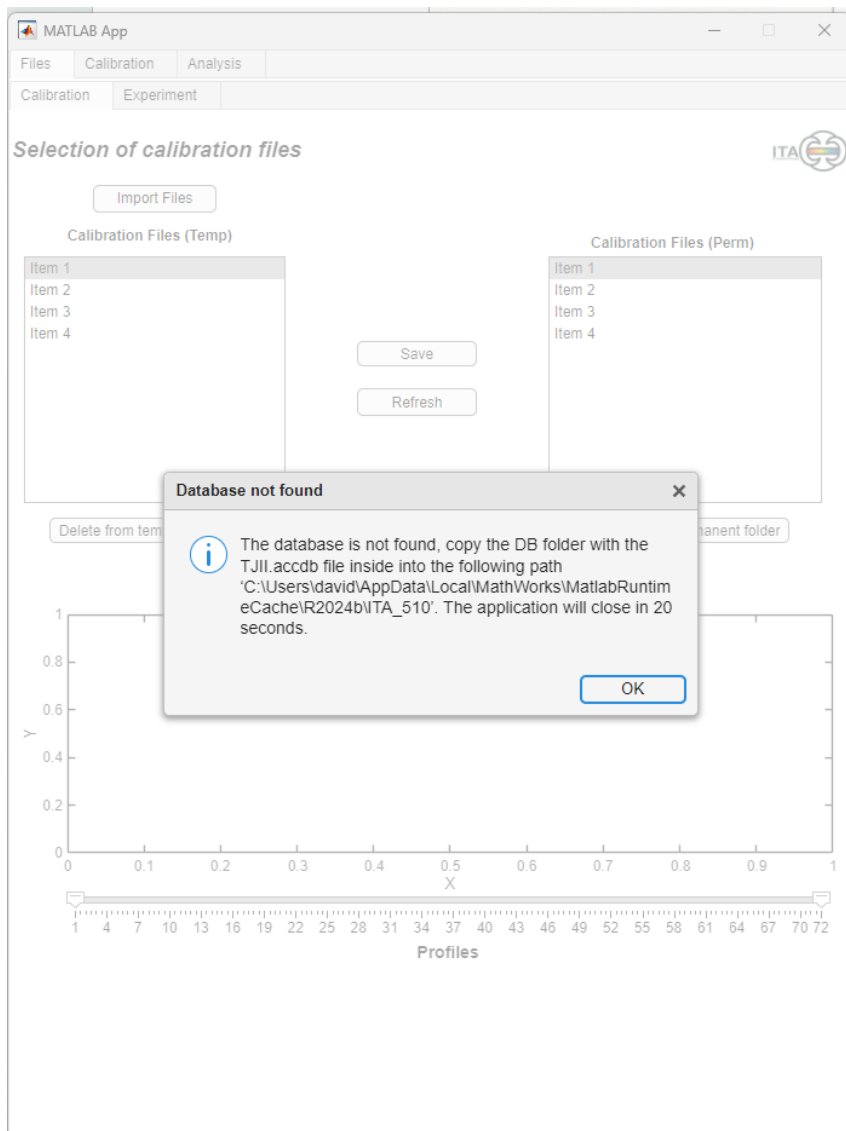
Por otro lado, el programa también es ejecutable desde un acceso directo, si lo creó durante la instalación. Lo encontrará en el escritorio o desde el buscador de aplicaciones de Windows:



Sea cual sea la forma en la que abra el programa, es importante tener en cuenta que, en la primera ejecución, debe abrirlo con permisos de administrador. Le aparecerá una pantalla de carga con el logo de ITA mientras se abre la aplicación, este proceso puede demorarse unos minutos.



Transcurrido ese tiempo, el programa se abrirá con una ventana emergente de información donde aparecerá un mensaje similar al siguiente:



“The database is not found, copy the DB folder with the TJII.acddb file inside into the following path ‘C:\Users\david\AppData\Local\MathWorks\MatlabRuntimeCache\R2024b\ITA_510’. The application will close in 20 seconds.”

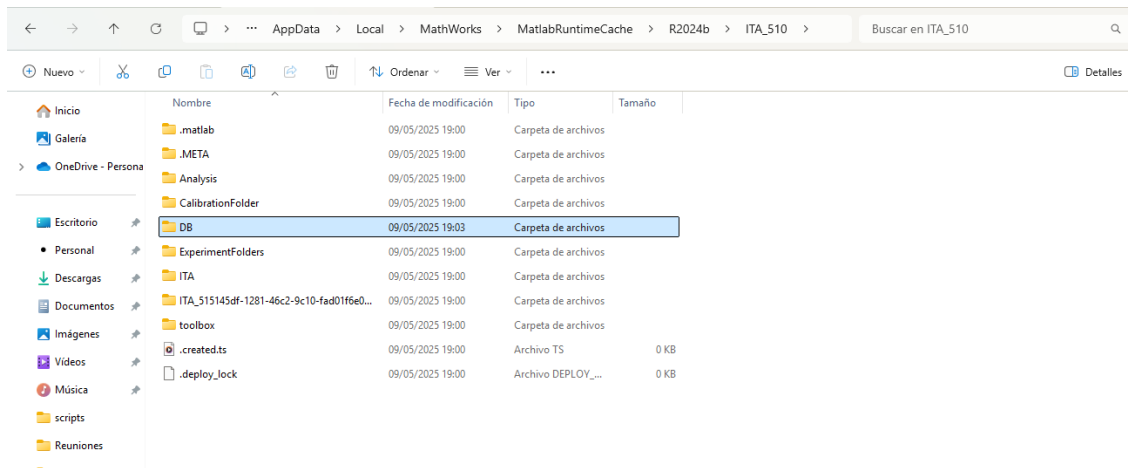
Copie o escriba la ruta que aparezca en su mensaje, la necesitará para el siguiente paso, en este caso: “C:\Users\david\AppData\Local\MathWorks\MatlabRuntimeCache\R2024b\ITA_510” (esta ruta dependerá de su ordenador, puede variar en función de cada máquina).

Tras 20 segundos el programa se cerrará y mostrará una ventana de error:



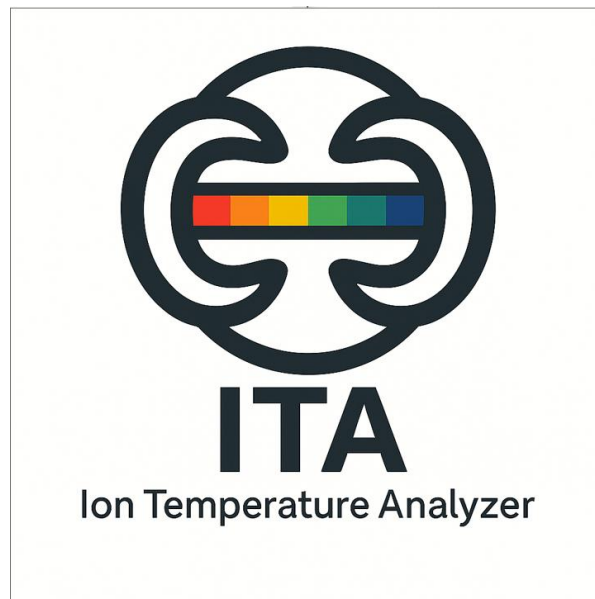
Paso 3: Copia de la carpeta "DB"

- Localice la carpeta "DB" dentro de "ITA_Installer".
- Copie esta carpeta.
- Diríjase a la ruta que acaba de guardar
C:\Users\david\AppData\Local\MathWorks\MatlabRuntimeCache\R2024b\ITA_510 (En el caso del tutorial, recuerde que esta ruta podrá ser diferente para usted)
- Pegue aquí la carpeta "DB".

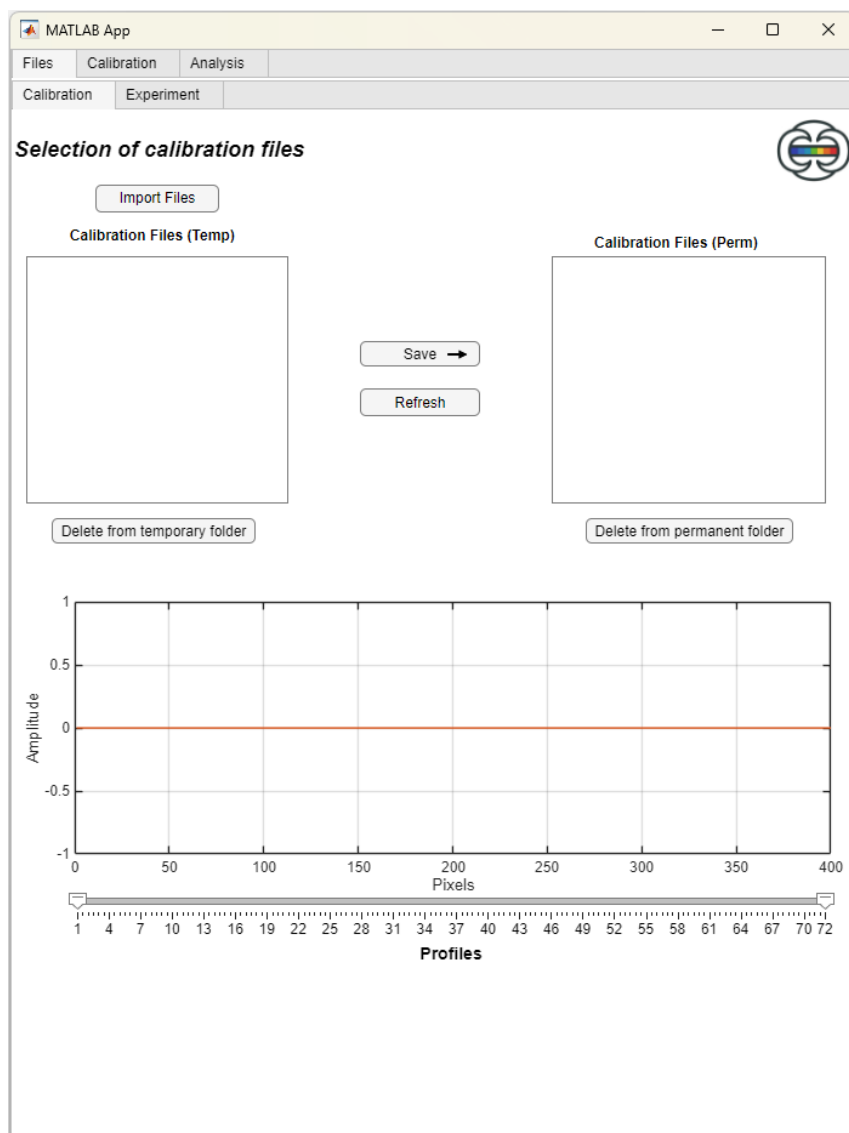


Paso 4: Ejecución de ITA

Vuelva a abrir ITA, ya no es necesario usar permisos de administrador.



Compruebe que el programa se inicia sin problemas.



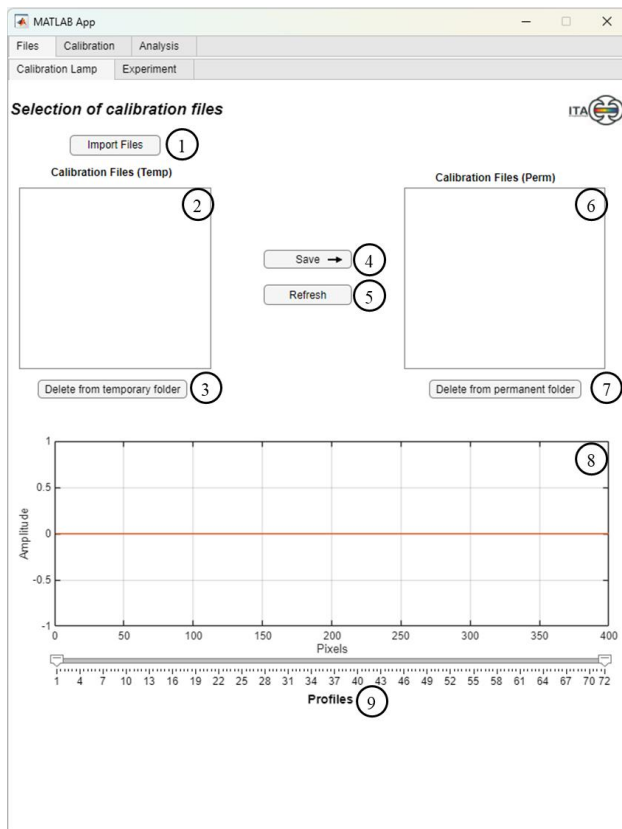
Consejo adicional (opcional)

- Se recomienda crear un acceso directo al archivo "**ITA.exe**" en su escritorio para facilitar el acceso.
A partir de este instante puede comenzar a utilizar ITA para el análisis espectroscópico.

Anexo B Manual de Usuario

Pestaña File: Calibration

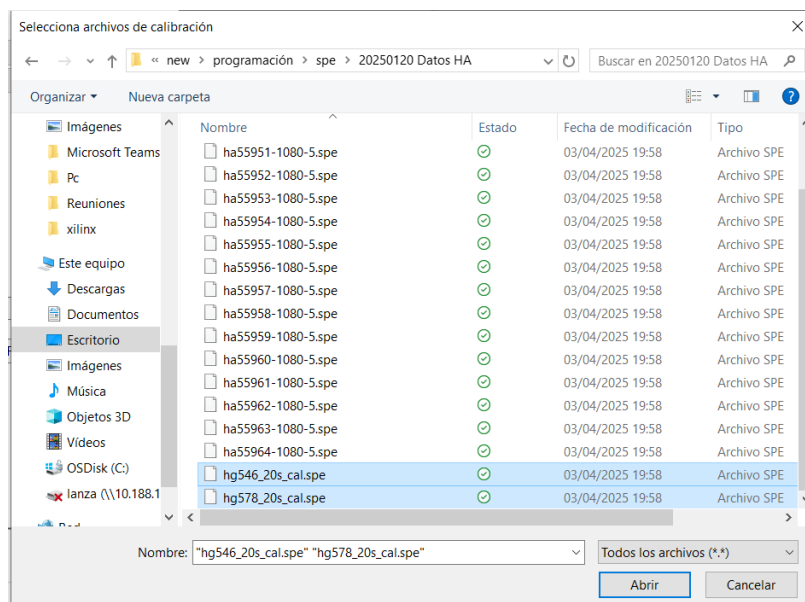
Uso básico:



1. Botón para importar ficheros .spe a la carpeta temporal
2. Lista de ficheros .spe en la carpeta temporal
3. Botón para eliminar ficheros .spe de la carpeta temporal
4. Botón para pasar un fichero .spe de la carpeta temporal a la permanente y viceversa
5. Botón para refrescar las listas con los ficheros .spe
6. Lista de ficheros .spe en la carpeta permanente
7. Botón para eliminar ficheros .spe de la carpeta permanente
8. Gráfica de visualización del fichero .spe
9. Barra para seleccionar perfiles del fichero .spe a visualizar la gráfica

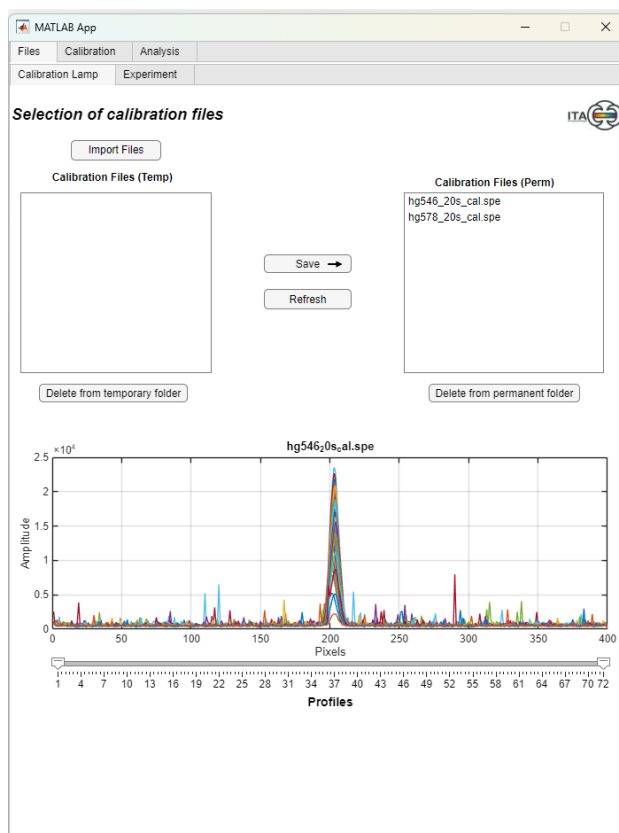
Al iniciar por primera vez ITA, no habrá ficheros cargados. Siga estos pasos para cargar los ficheros de calibración:

1. Pulse el **Botón 1** para seleccionar los ficheros de calibración.



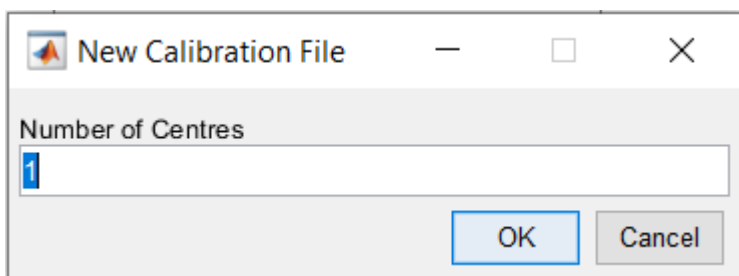
2. Una vez seleccionados, la lista (**Lista 2**) se actualizará mostrando los archivos disponibles.

3. Al hacer clic en un fichero de la lista, su contenido se visualizará en la gráfica (**Gráfica 8**) para confirmar que el fichero es adecuado.

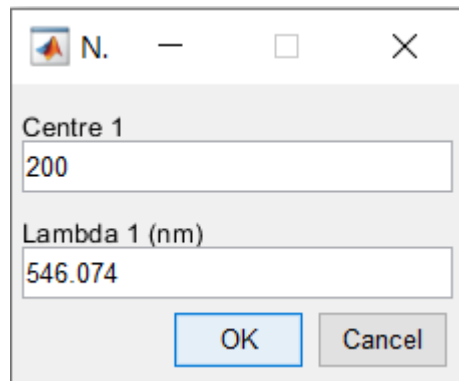


Guardarlo permanentemente:

- Pulse el **Botón 4** para mover el archivo a la carpeta permanente. Aparecerá una ventana solicitando:
 - **Número de Gaussianas** del fichero.

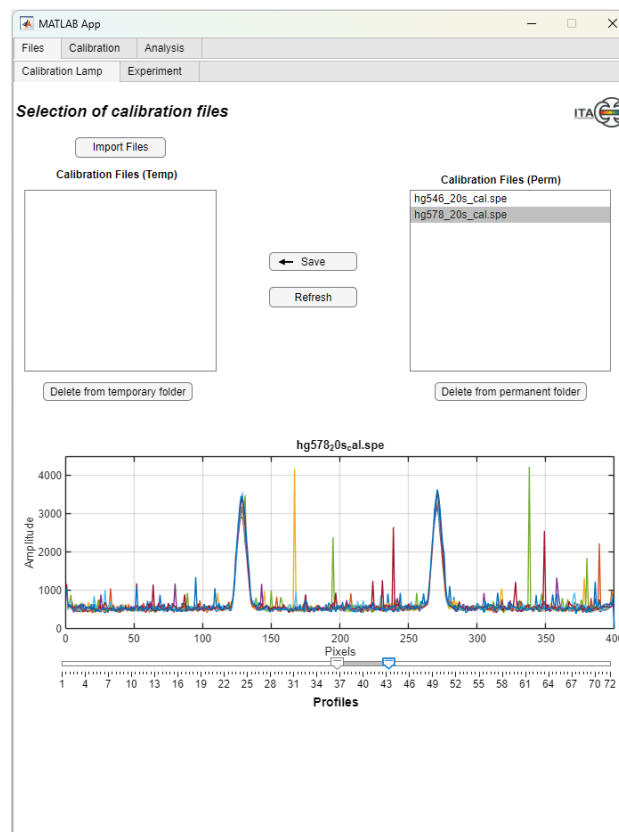


- **Centros** (en píxeles) y las **longitudes de onda** correspondientes (en nm).



Nota: ITA sugiere automáticamente valores para los centros y píxeles del lóbulo principal en archivos .spe. Estos valores son recomendaciones, pero puede modificarlos según su conocimiento o requerimientos específicos.

Una vez guardados, los ficheros permanecerán disponibles a menos que los elimine con el **Botón 7** o los devuelva a la carpeta temporal usando nuevamente el **Botón 4**.



Elementos de la pestaña:

La pestaña de gestión de ficheros de ITA permite al usuario organizar, visualizar y preparar los datos espectrales necesarios para el análisis. Cada elemento de la interfaz está numerado en la figura del inicio, y sus funciones se describen a continuación:

1. Botón para importar ficheros .spe a la carpeta temporal

Permite al usuario seleccionar e importar uno o varios ficheros .spe desde el sistema de archivos local a la carpeta temporal de la aplicación. Esta carpeta actúa como espacio de trabajo intermedio para organizar los datos antes de su análisis.

2. Lista de ficheros .spe en la carpeta temporal

Muestra todos los ficheros .spe disponibles en la carpeta temporal. Cada fichero corresponde a una adquisición espectral, y el usuario puede seleccionarlo para visualizar sus contenidos.

3. **Botón para eliminar ficheros .spe de la carpeta temporal**

Permite eliminar de forma definitiva los ficheros seleccionados de la carpeta temporal. Esta funcionalidad es útil para descartar datos no válidos o redundantes.

4. **Botón para pasar un fichero .spe de la carpeta temporal a la permanente y viceversa**

Facilita la transferencia de ficheros entre la carpeta temporal y la carpeta permanente. El usuario puede mover datos procesados a la carpeta permanente o devolverlos a la temporal para su revisión o modificación.

5. **Botón para refrescar las listas con los ficheros .spe**

Actualiza las listas de ficheros en ambas carpetas (temporal y permanente), garantizando que los cambios recientes (como adiciones o eliminaciones) se reflejen correctamente en la interfaz.

6. **Lista de ficheros .spe en la carpeta permanente**

Muestra los ficheros almacenados de forma definitiva en la carpeta permanente.

7. **Botón para eliminar ficheros .spe de la carpeta permanente**

Permite eliminar de forma definitiva ficheros seleccionados de la carpeta permanente, liberando espacio o descartando datos obsoletos.

8. **Gráfica de visualización del fichero .spe**

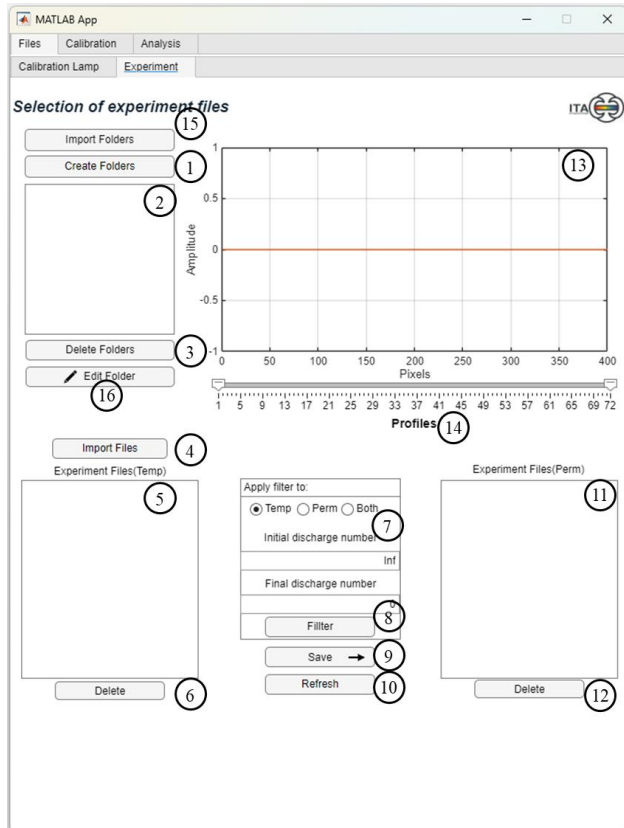
Muestra una representación gráfica del contenido del fichero seleccionado, permitiendo al usuario inspeccionar la señal espectral y evaluar su calidad.

9. **Barra para seleccionar perfiles del fichero .spe a visualizar en la gráfica**

Permite elegir el canal específico dentro del fichero .spe que se desea visualizar. Esto es fundamental, ya que cada fichero puede contener múltiples perfiles correspondientes a diferentes cuerdas de visión del plasma.

Pestaña File: Experiment

Uso básico:



1. Botón para crear una carpeta para almacenar ficheros .spe para experimentos
2. Lista de carpetas creadas
3. Botón para eliminar las carpetas
4. Botón para subir ficheros .spe a la carpeta temporal seleccionada en la lista 2
5. Lista de ficheros .spe dentro de la carpeta temporal seleccionada en la lista 2
6. Botón para eliminar ficheros de la carpeta temporal seleccionada en la lista 2
7. Ventana para seleccionar filtros en base al número de descarga para la carpeta temporal, permanente o ambas
8. Botón para aplicar el filtro 7
9. Botón para pasar un fichero de la carpeta temporal a la permanente y viceversa
10. Botón para refrescar el contenido de las listas de esta pestaña
11. Lista de ficheros .spe de la carpeta permanente seleccionada en la lista 2
12. Botón para borrar ficheros de la carpeta permanente seleccionada en la lista 2
13. Gráfica para visualizar los ficheros .spe seleccionados en las listas 5 y 11
14. Barra para seleccionar los perfiles que se quiere visualizar en la gráfica 13
15. Botón para importar carpetas con ficheros .spe
16. Botón para modificar la información vinculada a las carpetas

Para organizar los ficheros experimentales, siga estos pasos:

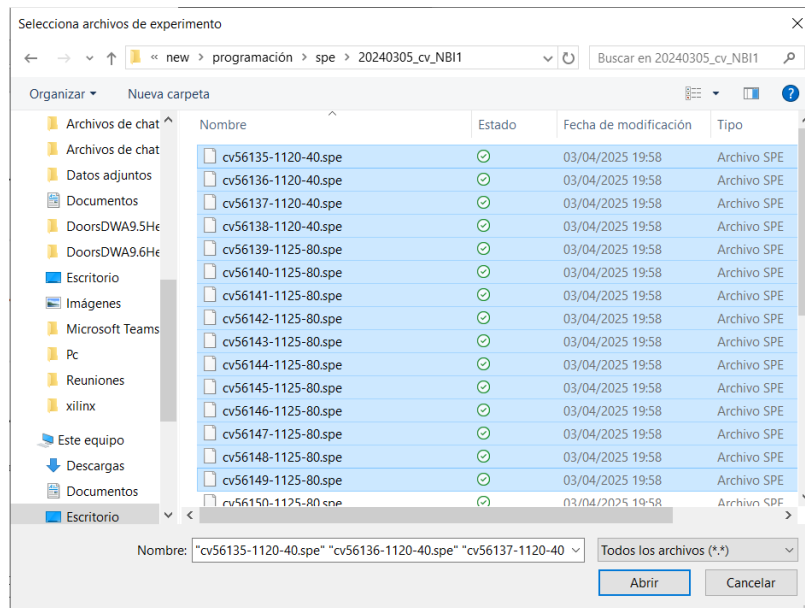
1. Pulse el **Botón 1** para crear una nueva carpeta con datos del experimento. Se le solicitará información sobre la carpeta y los archivos .spe que contendrá.

The 'New Folder Data' dialog box contains the following fields and values:

- Folder Name: CV
- Diffraction Order: 3
- Tuned Wavelength: 681.3
- Mass: 12.001
- Description: (empty text area)

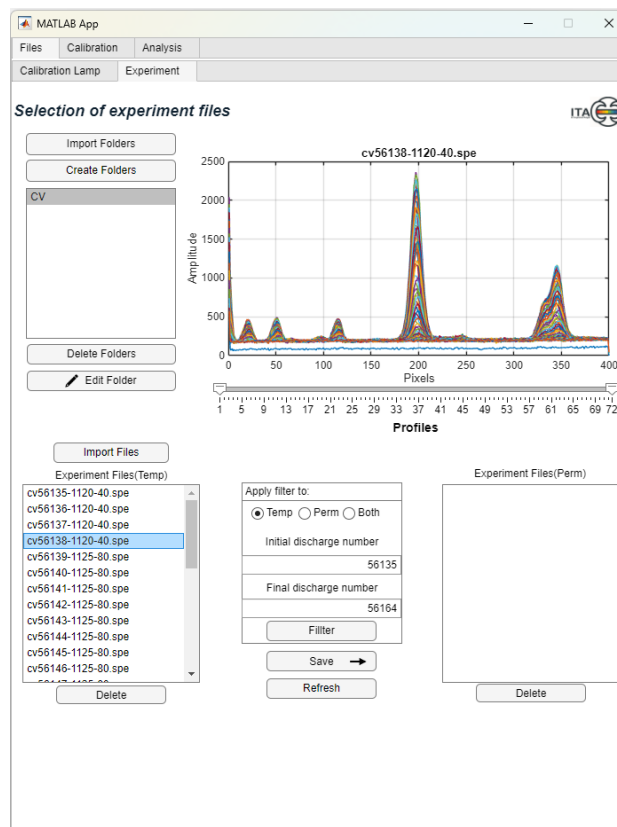
Buttons: OK, Cancel

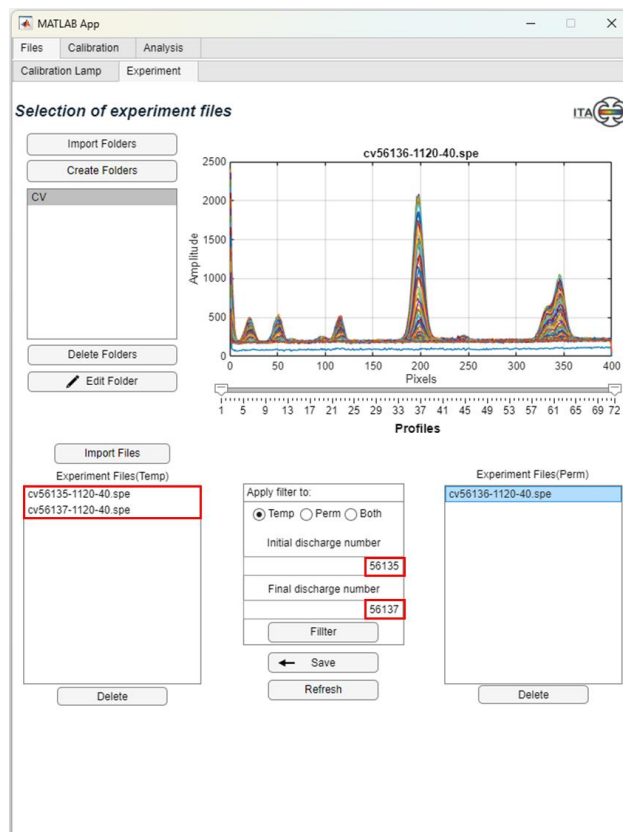
2. Seleccione la carpeta recién creada en la lista (**Lista 2**) y añada ficheros mediante el **Botón 4**. Esta información se conserva y puede ser modificada pulsando el Botón 16



3. Confirme que el fichero es correcto visualizando la gráfica (**Gráfica 13**).
4. Finalmente, transfiera los archivos a la carpeta permanente pulsando el **Botón 9** para poder trabajar con ellos en otras funciones del programa.

Si cuenta con numerosos ficheros .spe, puede filtrar el contenido utilizando el cuadro de búsqueda (**Ventana 7**) y confirmar el filtrado con el **Botón 8**.





Elementos de la pestaña:

Esta pestaña de ITA permite gestionar de forma avanzada las carpetas de experimentos y los ficheros .spe asociados, facilitando la organización de los datos y su posterior análisis. Cada elemento de la interfaz está numerado en la figura correspondiente, y sus funcionalidades se describen a continuación:

1. **Botón para crear una carpeta para almacenar ficheros .spe de experimentos**
Permite al usuario crear nuevas carpetas dentro de la estructura de almacenamiento de ITA, donde se organizarán los ficheros de diferentes experimentos.
2. **Lista de carpetas creadas**
Muestra todas las carpetas disponibles en el sistema, cada una de las cuales agrupa ficheros correspondientes a diferentes experimentos.
3. **Botón para eliminar las carpetas**
Elimina de forma definitiva las carpetas seleccionadas de la lista 2, junto con su contenido asociado, si el usuario así lo desea.
4. **Botón para subir ficheros .spe a la carpeta temporal seleccionada en la lista 2**
Facilita la carga de nuevos ficheros .spe en la carpeta temporal seleccionada previamente. Este paso es esencial para preparar los datos antes del análisis.
5. **Lista de ficheros .spe dentro de la carpeta temporal seleccionada en la lista 2**
Muestra todos los ficheros .spe disponibles en la carpeta temporal seleccionada. El usuario puede seleccionar uno o varios ficheros para procesar o visualizar.
6. **Botón para eliminar ficheros de la carpeta temporal seleccionada en la lista 2**
Permite eliminar de forma definitiva los ficheros seleccionados en la lista 5, optimizando así el almacenamiento y evitando duplicados.
7. **Ventana para seleccionar filtros en base al número de descarga para la carpeta temporal, permanente o ambas**

Permite definir filtros para buscar y visualizar ficheros .spe específicos según el número de descarga (número de disparo experimental) en las carpetas temporal, permanente o ambas.

8. **Botón para aplicar el filtro 7**

Aplica los criterios de búsqueda definidos en el filtro, actualizando las listas de ficheros para mostrar solo los que cumplen las condiciones especificadas.

9. **Botón para pasar un fichero de la carpeta temporal a la permanente y viceversa**

Permite transferir los ficheros seleccionados de la carpeta temporal a la carpeta permanente viceversa, asegurando la correcta organización de los datos.

10. **Botón para refrescar el contenido de las listas de esta pestaña**

Actualiza todas las listas de carpetas y ficheros para reflejar los cambios recientes, como la creación, eliminación o modificación de carpetas y ficheros.

11. **Lista de ficheros .spe de la carpeta permanente seleccionada en la lista 2**

Muestra los ficheros almacenados de forma definitiva en la carpeta permanente seleccionada, ya procesados o listos para su análisis.

12. **Botón para borrar ficheros de la carpeta permanente seleccionada en la lista 2**

Elimina de forma definitiva los ficheros seleccionados de la lista 11.

13. **Gráfica para visualizar los ficheros .spe seleccionados en las listas 5 y 11**

Muestra una representación gráfica del contenido de los ficheros seleccionados, facilitando la inspección visual de las señales espectrales y su calidad.

14. **Barra para seleccionar los perfiles que se quieren visualizar en la gráfica 13**

Permite elegir qué canal del fichero .spe visualizar en la gráfica

15. **Botón para importar carpetas con ficheros .spe**

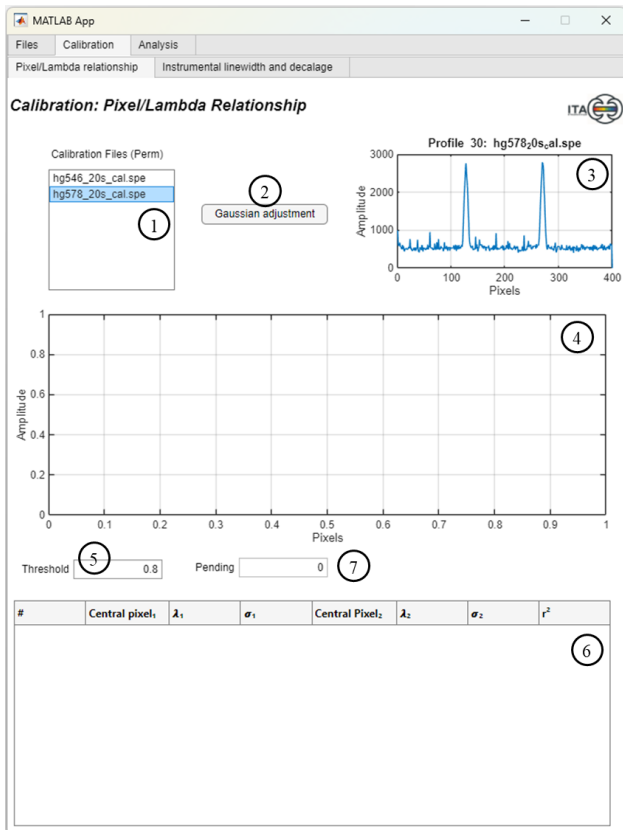
Permite cargar de forma masiva carpetas completas con múltiples ficheros .spe, agilizando el proceso de incorporación de datos al sistema.

16. **Botón para modificar la información vinculada a las carpetas**

Permite editar metadatos y atributos asociados a las carpetas, como el nombre, la descripción o los datos experimentales.

Pestaña Calibration: Pixel/Lambda Relationship

Uso básico:

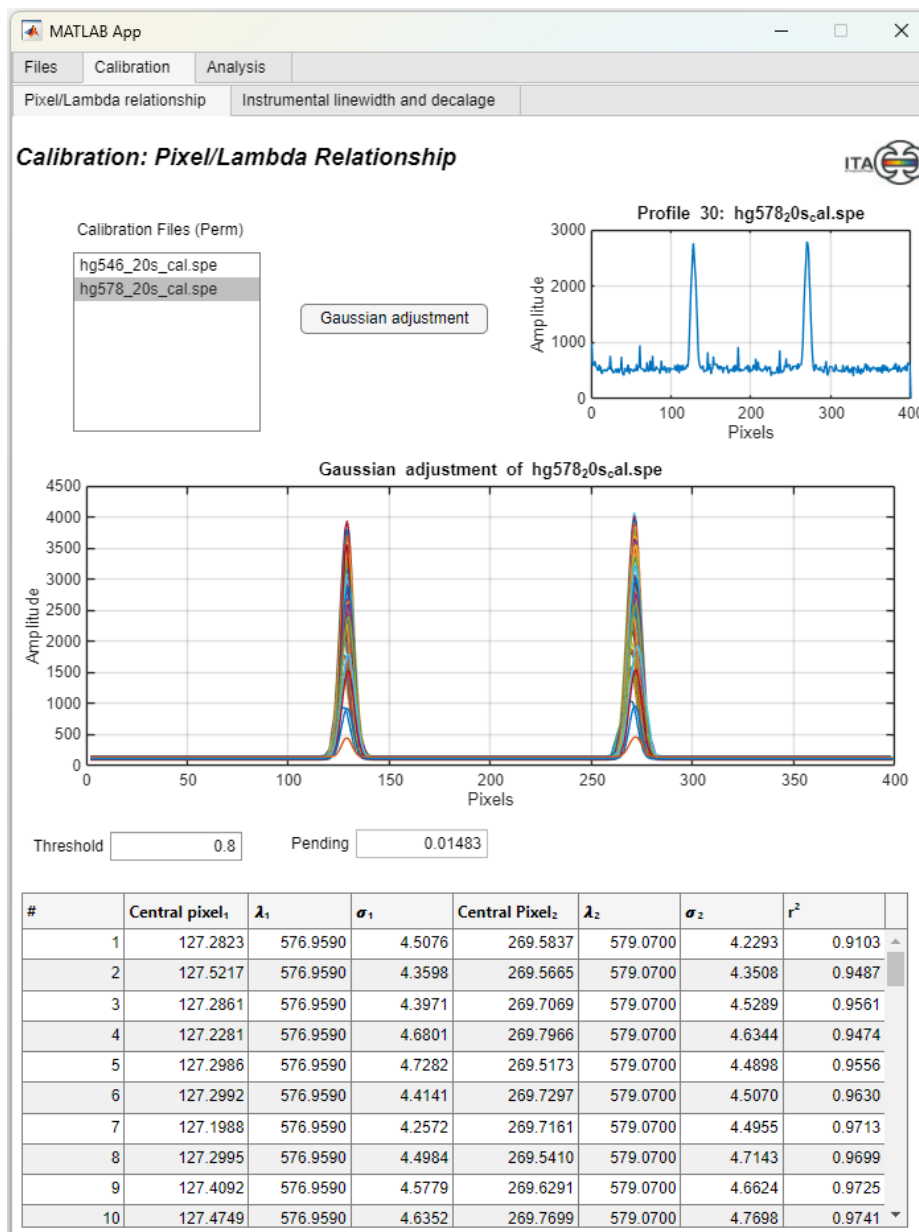


1. Lista con los ficheros de calibración que hay en la carpeta permanente
2. Botón para realizar el ajuste gaussiano y extrae la información de calibración del fichero seleccionado en la lista 1
3. Gráfica de visualización del fichero seleccionada en la lista 1
4. Gráfica de visualización del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1
5. Umbral que se usará para dar el ajuste gaussiano por bueno en base al r^2
6. Información del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1
7. Dispersión lineal del fichero de calibración usado para la realización de la relación píxel-longitud de onda

En esta pestaña, se ajustan parámetros gaussianos necesarios para establecer la relación píxel-longitud de onda:

1. Seleccione un fichero de calibración adecuado de la lista (**Lista 1**).
2. Confirme visualmente el archivo en la gráfica (**Gráfica 3**).
3. Pulse el **Botón 3** para realizar el ajuste gaussiano.

El resultado se visualizará en la gráfica (**Gráfica 4**) y los parámetros aparecerán en la tabla (**Tabla 6**).



Elementos de la pestaña:

Esta pestaña permite realizar el ajuste gaussiano a los ficheros de calibración y obtener los parámetros necesarios para el cálculo de la dispersión lineal. Cada elemento de la interfaz, numerado en la figura correspondiente, tiene la siguiente funcionalidad:

1. Lista con los ficheros de calibración que hay en la carpeta permanente

Muestra todos los ficheros de calibración disponibles en la carpeta permanente de la aplicación. El usuario puede seleccionar el fichero que desea procesar para realizar el ajuste gaussiano.

2. Botón para realizar el ajuste gaussiano y extraer la información de calibración del fichero seleccionado en la lista 1

Ejecuta automáticamente el proceso de ajuste gaussiano sobre el fichero de calibración seleccionado. Este ajuste extrae los parámetros necesarios para el posterior procesado

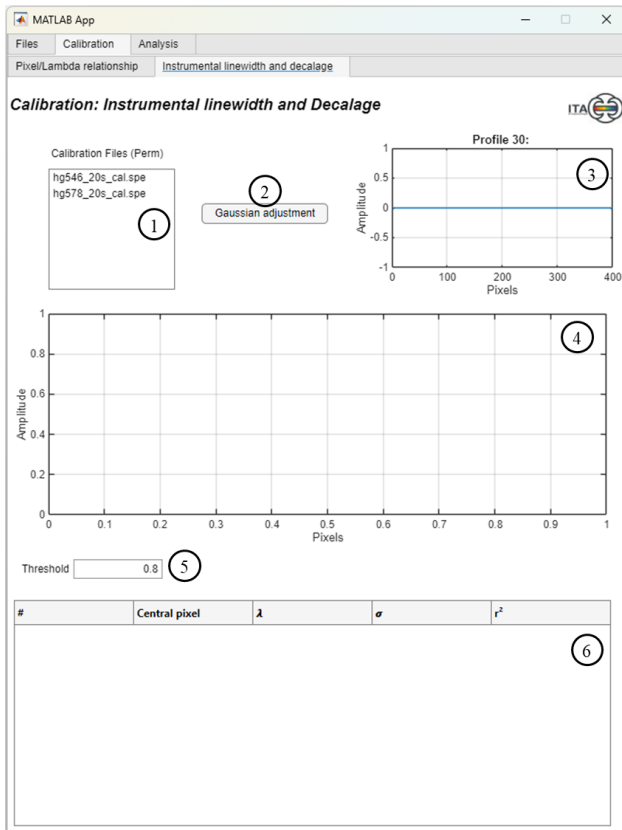
3. Gráfica de visualización del fichero seleccionado en la lista 1

Muestra la representación gráfica de la señal espectral contenida en el fichero de calibración seleccionado, facilitando la inspección visual de las líneas espectrales.

4. **Gráfica de visualización del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1**
Superpone la señal ajustada mediante funciones gaussianas a la señal original, permitiendo comparar visualmente el ajuste con los datos experimentales. Esto facilita la validación del resultado obtenido.
5. **Umbral que se usará para dar el ajuste gaussiano por bueno en base al R^2**
Permite al usuario establecer el valor mínimo aceptable del coeficiente de determinación (R^2) para considerar que un ajuste gaussiano es válido. Los perfiles con un R^2 inferior al umbral no se tendrán en cuenta en los cálculos posteriores.
6. **Información del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1**
Muestra un resumen numérico con los parámetros obtenidos en el ajuste: desplazamientos de picos, amplitudes, desviaciones estándar, R^2 , FWHM, entre otros. Estos datos son esenciales para la posterior calibración y análisis físico.
7. **Dispersión lineal del fichero de calibración usado para la realización de la relación píxel-longitud de onda**
Presenta el valor calculado de la dispersión lineal (m), es decir, la relación entre la longitud de onda y los píxeles del detector. Este factor es fundamental para transformar los datos del eje de píxeles al eje de longitudes de onda físicas.

Pestaña Calibration: Pixel/Lambda Relationship

Uso básico:

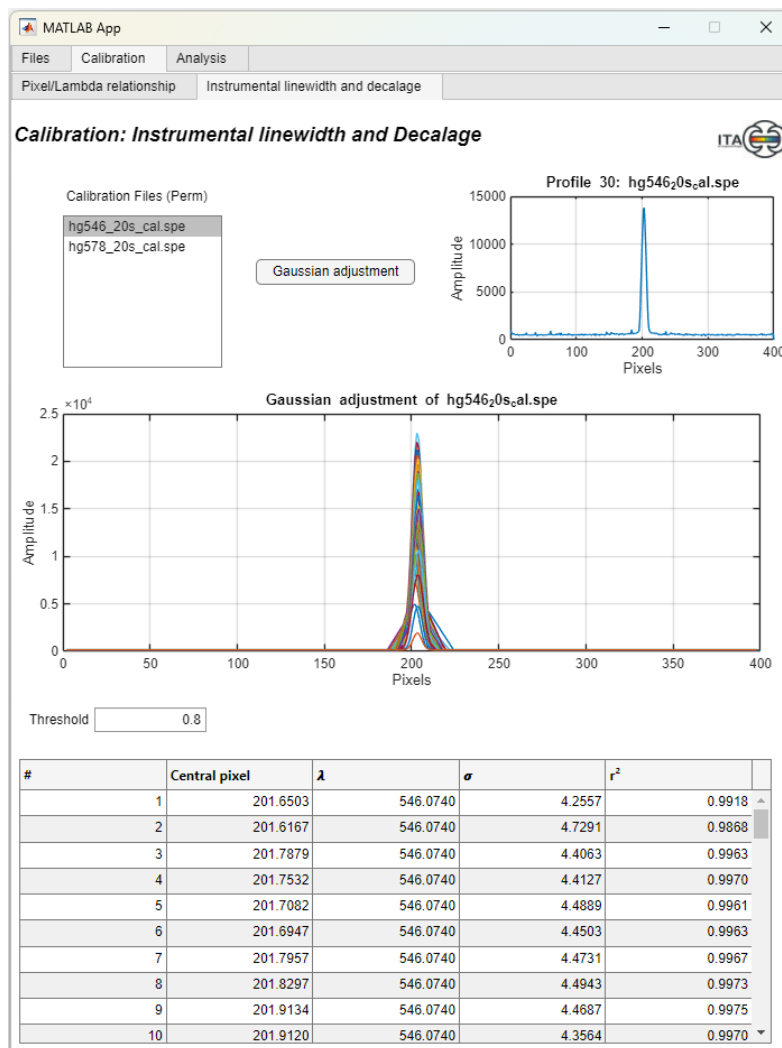


1. Lista con los ficheros de calibración que hay en la carpeta permanente
2. Botón para realizar el ajuste gaussiano y extrae la información de calibración del fichero seleccionado en la lista 1
3. Gráfica de visualización del fichero seleccionada en la lista 1
4. Gráfica de visualización del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1
5. Umbral que se usará para dar el ajuste gaussiano por bueno en base al r^2
6. Información del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1

Esta pestaña permite realizar ajustes gaussianos y calcular parámetros instrumentales:

1. Seleccione el fichero de calibración deseado desde la lista (**Lista 1**).
2. Confirme el archivo mediante la gráfica (**Gráfica 3**).
3. Realice el cálculo pulsando el **Botón 3**.

Los resultados del ajuste y parámetros aparecerán en la gráfica (**Gráfica 4**) y en la tabla (**Tabla 6**).



Elementos de la pestaña:

Esta pestaña permite realizar el ajuste gaussiano a los ficheros de calibración y obtener los parámetros necesarios para el cálculo de la dispersión lineal. Cada elemento de la interfaz, numerado en la figura correspondiente, tiene la siguiente funcionalidad:

- Lista con los ficheros de calibración que hay en la carpeta permanente**
Muestra todos los ficheros de calibración disponibles en la carpeta permanente de la aplicación. El usuario puede seleccionar el fichero que desea procesar para realizar el ajuste gaussiano.
- Botón para realizar el ajuste gaussiano y extraer la información de calibración del fichero seleccionado en la lista 1**
Ejecuta automáticamente el proceso de ajuste gaussiano sobre el fichero de calibración seleccionado. Este ajuste extrae los parámetros necesarios para el posterior procesamiento.
- Gráfica de visualización del fichero seleccionado en la lista 1**
Muestra la representación gráfica de la señal espectral contenida en el fichero de calibración seleccionado, facilitando la inspección visual de las líneas espectrales.
- Gráfica de visualización del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1**
Superpone la señal ajustada mediante funciones gaussianas a la señal original, permitiendo comparar visualmente el ajuste con los datos experimentales. Esto facilita la validación del resultado obtenido.
- Umbral que se usará para dar el ajuste gaussiano por bueno en base al R^2**

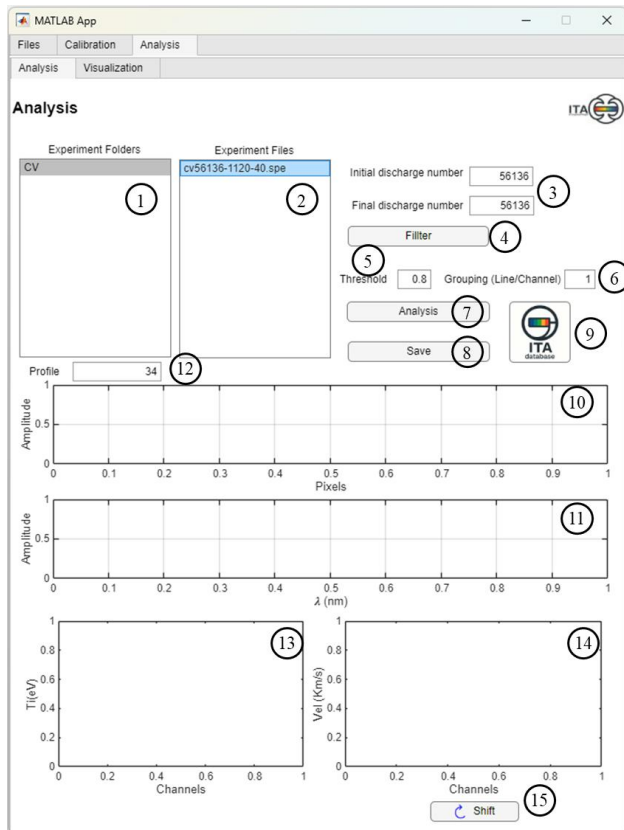
Permite al usuario establecer el valor mínimo aceptable del coeficiente de determinación (R^2) para considerar que un ajuste gaussiano es válido. Los perfiles con un R^2 inferior al umbral no se tendrán en cuenta en los cálculos posteriores.

6. **Información del ajuste gaussiano realizado al fichero seleccionado en la lista 1**

Muestra un resumen numérico con los parámetros obtenidos en el ajuste: desplazamientos de picos, amplitudes, desviaciones estándar, R^2 , anchura a media altura (FWHM), entre otros. Estos datos son esenciales para la posterior calibración y análisis físico.

Pestaña Analysis

Uso básico:



1. Lista con las distintas carpetas experimentales
2. Lista de ficheros .spe que contiene la carpeta seleccionada en la lista 1
3. Filtro que se aplica a la lista 2
4. Aplicación del filtro 3
5. Umbral que determina que ajuste es bueno en base al r^2
6. Agrupación de perfiles que se usara para el análisis
7. Realización del análisis del fichero .spe seleccionado en la lista 2
8. Guarda los datos del análisis llevado a cabo
9. Abrir la base de datos con la información previamente guardada
10. Representación del ajuste gaussiano realizado (eje x en píxeles)
11. Representación del ajuste gaussiano realizado (eje x longitud de onda)
12. Perfil que se representa en las gráficas 10 y 11
13. Perfiles de temperatura iónica del experimento
14. Perfiles de velocidad de rotación del experimento
15. Botón que cambia la gráfica 14 a una representación de perfiles de *shift*

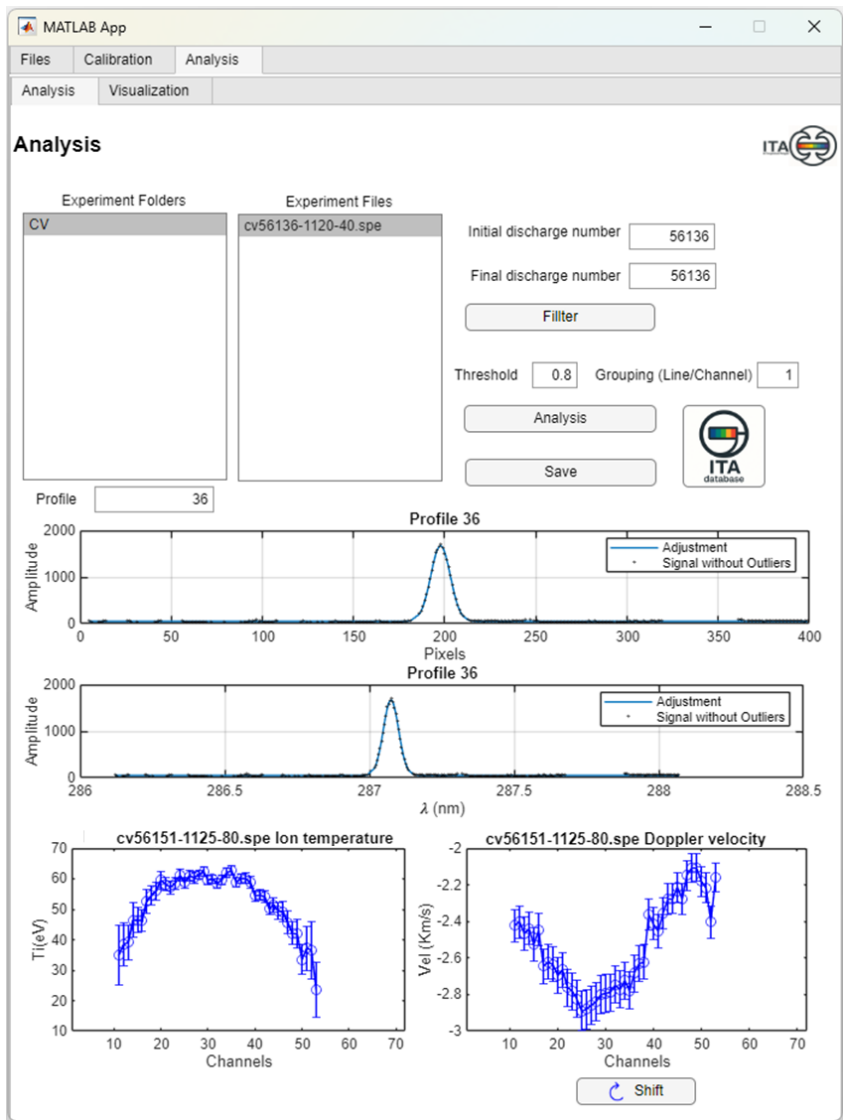
Tras completar los pasos previos de calibración, continúe con el análisis:

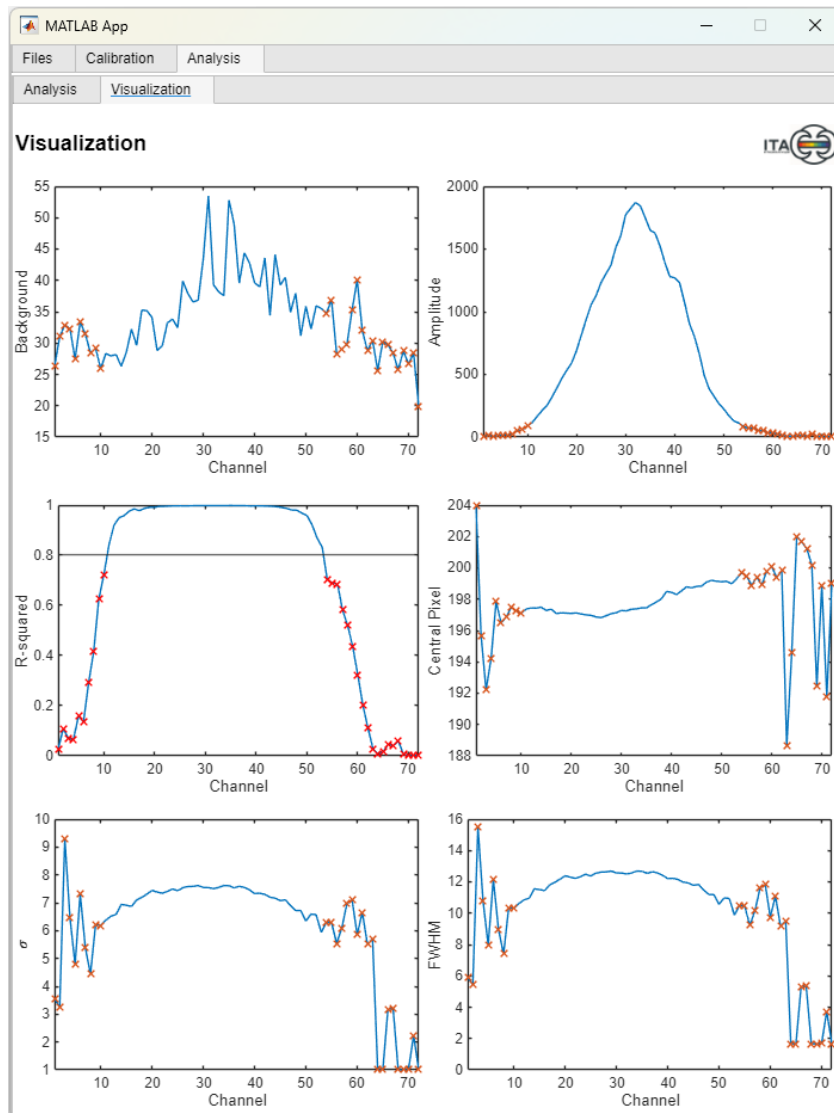
1. Seleccione el fichero a analizar usando las listas (**Lista 1** y **Lista 2**) y pulse el **Botón 7**.
2. Puede establecer opciones adicionales utilizando los campos (**Opciones 5** y **6**).

Tras pulsar el botón, aparecerá un formulario con información requerida sobre el experimento:

- **Obligatorios:** Número de centros, centros, shot number, elemento y agrupación (grouping).
- **Opcionales:** Información adicional que podrá completarse posteriormente desde la base de datos.

Una vez finalizado el análisis, ITA generará una representación gráfica del experimento, así como información adicional en la pestaña **Visualization**.





- Si la información es correcta y desea conservarla, pulse el **Botón 8** para guardarla.

Elementos de la pestaña:

Esta pestaña está diseñada para procesar automáticamente los ficheros .spe experimentales, aplicando las correcciones necesarias y obteniendo los parámetros físicos de interés (temperatura iónica, velocidad de rotación y desplazamiento Doppler). Los elementos numerados tienen las siguientes funcionalidades:

1. **Lista con las distintas carpetas experimentales**
Muestra las carpetas que contienen los ficheros .spe organizados por experimentos.
2. **Lista de ficheros .spe que contiene la carpeta seleccionada en la lista 1**
Muestra los ficheros .spe correspondientes a la carpeta de experimentos seleccionada en la lista 1.
3. **Filtro que se aplica a la lista 2**
Permite definir el número de disparo para filtrar los ficheros mostrados en la lista 2.
4. **Aplicación del filtro 3**
Botón que ejecuta la aplicación del filtro definido en 3 sobre la lista 2.
5. **Umbral que determina qué ajuste es bueno en base al R^2**
Campo donde el usuario establece el valor mínimo de R^2 para considerar válido un ajuste gaussiano. Los perfiles con un R^2 inferior no serán usados para el análisis físico.

6. **Agrupación de perfiles que se usará para el análisis**
Define el número de canales que se agruparán para el análisis.
7. **Realización del análisis del fichero .spe seleccionado en la lista 2**
Botón que ejecuta el procesamiento completo: corrección de pendiente, eliminación de offset y outliers, ajuste gaussiano, y cálculo de temperatura iónica, desplazamiento y velocidad de rotación.
8. **Guarda los datos del análisis llevado a cabo**
Permite almacenar los resultados del análisis realizado en la base de datos interna de la aplicación.
9. **Abrir la base de datos con la información previamente guardada**
Abre la base de datos y permite visualizar, modificar o filtrar los resultados guardados previamente.
10. **Representación del ajuste gaussiano realizado (eje x en píxeles)**
Gráfica que muestra la señal original y su correspondiente ajuste gaussiano en el dominio de los píxeles.
11. **Representación del ajuste gaussiano realizado (eje x en longitud de onda)**
Gráfica que muestra el ajuste gaussiano, pero transformado al dominio físico de las longitudes de onda, usando la calibración previa.
12. **Perfil que se representa en las gráficas 10 y 11**
Permite seleccionar qué canal del fichero experimental se muestra en las gráficas 10 y 11 para su inspección detallada.
13. **Perfiles de temperatura iónica del experimento**
Gráfica que muestra el perfil de temperatura iónica obtenido para cada canal en la descarga analizada.
14. **Perfiles de velocidad de rotación del experimento**
Gráfica que muestra el perfil de velocidades de rotación calculadas para cada canal en la descarga analizada.
15. **Botón que cambia la gráfica 14 a una representación de perfiles de shift**
Permite alternar la visualización entre la velocidad Doppler y el shift de los perfiles analizados.

