



Institut für Plasmaphysik
EURATOM Association

***Zur Anwendung der driftkinetischen
Theorie in Monte-Carlo-Studien zum
Verunreinigungstransport in
Tokamak-Plasmen***

Dirk Reiser

***Zur Anwendung der driftkinetischen
Theorie in Monte-Carlo-Studien zum
Verunreinigungstransport in
Tokamak-Plasmen***

Dirk Reiser

Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3508

ISSN 0944-2952

Institut für Plasmaphysik Jül-3508

EURATOM Association

D 61 (Diss. Univ. Düsseldorf)

Zu beziehen durch : Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

☎ 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · e-mail: zb-publikation@fz-juelich.de

Application of Drift Kinetic Theory in Monte-Carlo-Studies of Impurity Transport in Tokamak Plasmas

A drift kinetic model for the transport of non-maxwellian impurities is derived from first principles. This model fits in a consistent way in a hybrid concept, i.e. a combination of a fluid model for the background particles and a kinetic test particle description for the impurities. Impurities in a stationary toroidal magnetic field configuration are considered taking into account the interaction of the impurities with the background particles via Coulomb collisions. Also relevant processes like ionization, recombination and interactions with boundary materials in the tokamak are considered in the model. A Monte-Carlo-algorithm is presented for the numerical solution of the resulting model equations in realistic tokamak configurations. Results of simulations performed with the code DORIS for carbon and neon impurities in the tokamak TEXTOR are presented and discussed.

Zur Anwendung der driftkinetischen Theorie in Monte-Carlo-Studien zum Verunreinigungstransport in Tokamak-Plasmen

Ein driftkinetisches Modell zur Beschreibung des Transports nichtmaxwellscher Verunreinigungen wird aus ersten Prinzipien hergeleitet. Dieses Modell fügt sich in konsistenter Weise in ein Hybridkonzept, in dem die Hintergrundteilchen durch Fluid-Modelle, die Verunreinigungen jedoch im Rahmen der kinetischen Testteilchentheorie beschrieben werden. Betrachtet werden Verunreinigungen in einer stationären toroidalen Magnetfeldkonfiguration, die sich über Coulomb-Stöße in Wechselwirkung mit den Hintergrundteilchen befinden. Überdies werden relevante Prozesse wie Ionisation, Rekombination und Wechselwirkungen mit den Wandmaterialien des Tokamakgefäßes im Modell berücksichtigt. Zur numerischen Lösung der resultierenden driftkinetischen Modellgleichungen in realistischen Tokamakgeometrien wird ein Monte-Carlo-Algorithmus vorgestellt. Resultate aus Simulationsrechnungen mit dem Code DORIS zu Kohlenstoff- und Neonverunreinigungen im Tokamak TEXTOR werden vorgestellt und diskutiert.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Ein driftkinetisches Testteilchenmodell für den Transport von Verunreinigungen	7
1.1 Kinetische Gleichung für Transportprozesse in vollionisierten Plasmen	7
1.2 Testteilchenmodell für Verunreinigungen in Fluid-Plasmen	12
1.3 Übergang zur driftkinetischen Beschreibung	14
1.3.1 Allgemeine Transformation des Coulomb-Stoßterms	15
1.3.2 Berechnung der transformierten Drift- und Diffusionskoeffizienten	17
1.3.3 Driftkinetische Approximation des Liouville-Terms	23
1.4 Erweiterung des Transportmodells für Anwendungen in Tokamak-Plasmen	26
1.5 Anmerkungen zum Modell-Coulomb-Term	28
1.5.1 Die Thermokraft	28
1.5.2 Limits für die räumlichen Inhomogenitäten der Hintergrundverteilung	35
2 Numerische Lösung einer Fokker-Planck-Gleichung durch Monte-Carlo-Simulation	41
2.1 Die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung für Markov-Prozesse	41
2.2 Fokker-Planck-Gleichung und stochastische Differentialgleichungen	44
2.3 Die numerische Methode I: Fokker-Planck-Gleichung und Master-Gleichung	45
2.3.1 Beispiel 1: Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß (1-dimensional)	49
2.3.2 Beispiel 2: Coulomb-Wechselwirkung (2-dimensional)	55
2.3.3 Beispiel 3: Coulomb-Wechselwirkung (3-dimensional)	60
2.4 Die numerische Methode II: Teilchenumwandlungsprozesse im Algorithmus	65

2.5	Die numerische Methode III: Simulation von Teilchenquellen und -senken	67
3	Numerische Anwendungen für TEXTOR – Der Code DORIS	69
3.1	Details der praktischen Monte-Carlo-Simulation für TEXTOR . .	70
3.1.1	Das Magnetfeld und die Rechengemetrie	70
3.1.2	Ionisations- und Rekombinationsraten für C und Ne	74
3.1.3	Strahlungsraten für C und Ne	74
3.1.4	Physikalische Zerstäubung des Kohlenstofflimiters	78
3.2	Übersicht und Details zu den Simulationsrechnungen	83
3.3	Kopplung an den B2-EIRENE-Code	87
3.3.1	Thermalisierung von Limiter-Kohlenstoff	87
3.3.2	Strahlungsprofil von Limiter-Kohlenstoff	95
3.3.3	Dichte-Profile von Limiter-Kohlenstoff; Vergleich der Thermokräfte der Codes DORIS und DIVIMP	103
3.4	Simulationen auf semi-empirischem Modell-Plasmahintergrund . .	106
3.4.1	Strahlungsprofil von Limiter-Kohlenstoff	109
3.4.2	Strahlungsprofil von Limiter-Neon	113
3.5	Bewertung der numerischen Ergebnisse	116
	Zusammenfassung	117
A	Berechnung der Integrale $I^1, I^2, I_i^3, I_i^4, I_{ik}^5, I_{ik}^6$	124
B	Die Potentialfunktionen $\phi_0, \phi_1, \phi_2, \psi_0, \psi_1, \psi_2$	130
C	Sprungprozeßapproximation eines Diffusionsprozesses	133
D	Semi-empirisches Modell für Hauptplasma-Parameter in TEXTOR	136
E	Statistische Auswertung des Monte-Carlo-Algorithmus	141
F	Artifizielle Quellen und Senken bei der driftkinetischen Approximation	144
G	Übersicht über die Größenordnung der Transportterme und Abschätzung des Monte-Carlo-Zeitschritts	147
H	Vergleich des Codes DORIS mit anderen Monte-Carlo-Transport-Codes	152

Einleitung

Die Nutzung der Kernfusion zielt darauf ab, mit technischen Mitteln ein gezündetes Plasma zu erzeugen, in welchem die Energie, die bei der Verschmelzung von Deuteronen und Tritonen zu Heliumkernen frei wird, ausreicht, um die Fusionsprozesse aufrechtzuerhalten und gleichzeitig einen Nettoenergiegewinn zu gewährleisten.

Gegenwärtig stellen Tokamakkonfigurationen das führende Konzept zur Annäherung an die Zündbedingung dar.

In einem Tokamak wird versucht, ein Hochtemperaturplasma in toroidalen Magnetfeldkonfigurationen räumlich einzuschließen, um damit die Teilchen- und Energiedichte im Tokamakvolumen so weit zu erhöhen, daß ein dauerhaftes Brennen des Plasmas möglich wird.

Neben der Aufgabe, die Plasmen magnetisch einzuschließen, besteht das Problem, die Konzentration von Verunreinigungen, d. h. Partikel, die nicht an der Fusionsreaktion teilnehmen, im Plasmavolumen gering zu halten.

Da auch das Fusionsprodukt Helium zu den Verunreinigungen zählt, ist ihr Vorhandensein im Plasma unvermeidbar. Überdies steht das Plasma ständig in Kontakt mit begrenzenden Wandmaterialien des Tokamaks, die unter der Wirkung energiereicher Teilchenflüsse zerstäubt und verdampft werden, womit weitere Verunreinigungen in das Plasma gelangen.

Verunreinigungen beeinflussen in starkem Maße das Verhalten und die Eigenschaften des Gesamtplasmas, wobei ihnen eine ambivalente Rolle zukommt: Im Kernplasma sind sie unerwünscht, denn sie verdünnen den Fusionsbrennstoff und entziehen dem Plasma, im Falle nicht vollständig ionisierter Verunreinigungen, Energie durch Linienstrahlung. Am Rande des Plasmas hingegen ist eine Abkühlung durch Linienstrahlung erwünscht, denn die gleichmäßig abgestrahlte Energie entlastet einzelne stark exponierte Bauteile des Tokamakgefäßes. Aus diesem Grunde werden gezielt eingebrachte Verunreinigungen für die Rand-schichtkühlung genutzt.

Die geschilderte Situation begründet das Interesse an einem detaillierten Verständnis des Transportverhaltens von Verunreinigungen in Plasmen. Realistische Modelle sollen dabei helfen, einen Kompromiß zwischen den sich widersprechenden Absichten einer Nutzung und einer Vermeidung von Verunreinigungen

zu finden.

Thema dieser Arbeit ist die Begründung eines theoretischen Modells für den Transport von Verunreinigungen in Tokamakplasmen und die Entwicklung eines darauf basierenden numerischen Monte-Carlo-Codes. Numerische Rechnungen sollen Aufschluß geben über die Dichte- und Energieverteilung, die Eindringtiefe und die abgestrahlte Leistung von Verunreinigungen im Poloidalschnitt eines Tokamaks realistischer Dimensionen.

Der Einsatz numerischer Methoden hat sich bei Problemstellungen dieser Art als unentbehrliches Werkzeug erwiesen, denn die mathematische Formulierung theoretischer Modelle führt aufgrund der Komplexität des Vielteilchensystems Plasma auf Gleichungssysteme, die nur in stark vereinfachten Fällen eine geschlossene analytische Lösung zulassen.

Der Transport geladener Teilchen in Plasmen wird vornehmlich bestimmt durch die Coulomb-Wechselwirkung mit anderen Teilchen, durch die dort vorherrschenden elektromagnetischen Felder, die sich aus externen und internen, d. h. von den Plasmateilchen selbst aufgebauten, Feldern zusammensetzen, und durch den speziellen Charakter der jeweiligen Teilchenquelle. Gleichzeitig treten z. B. Ionisations- und Rekombinationsprozesse auf, und auch können Teilchen in lokalisierten Senken absorbiert werden.

Ausgangspunkt für theoretische Modelle sind die kinetischen Gleichungen der statistischen Physik, welche die zeitliche Entwicklung der Verteilung der einzelnen Teilchenspezies im Phasenraum beschreiben.

Die erwähnte Vielzahl von physikalischen Effekten, die das Plasmaverhalten bestimmen, führt in der allgemeinen mathematischen Beschreibung auf bislang analytisch wie auch numerisch unlösbare Systeme sogenannter gekoppelter Integro-Differential-Gleichungen.

Unterschiedliche Ansätze wurden entwickelt, um die allgemeinen Gleichungen für theoretische Überlegungen und praktische Rechnungen verwendbar zu machen. Vom numerischen Standpunkt aus hat sich die Fluidnäherung als besonders erfolgreich erwiesen. Hierbei ergeben sich durch Integration der kinetischen Gleichungen über die Geschwindigkeitskoordinaten gekoppelte Differentialgleichungen (verallgemeinerte Navier-Stokes-Gleichungen) für makroskopische Plasmagrößen. Für derartige Gleichungssysteme steht eine Vielzahl numerischer Lösungsmethoden zur Verfügung, doch wird dieser Vorteil durch eine Einschränkung des physikalischen Modells erreicht, da implizit die Annahme eines nur leicht gestörten lokalen Gleichgewichts im Plasma gemacht wird. Außerdem erfordern dabei numerische Probleme für gewöhnlich die Annahme einer einheitlichen Temperatur aller Ionen im Plasma.

Obgleich die Erfahrung gezeigt hat, daß die Wasserstoffionen und die Elektronen (das Hauptplasma) in Tokamaks meist befriedigend mit Hilfe der hydrodynamischen Methoden modelliert werden können, fügen sich Neutralteilchen und niedrig

ionisierte Verunreinigungen für typische Tokamakszenarien nicht in das Bild der Fluidmodelle. Ihre Kurzlebigkeit, d. h. schnelle Ionisation im Vergleich zu typischen Stoßzeiten, verhindert das Erreichen eines Quasi-Gleichgewichts und einer Thermalisierung durch Coulomb-Wechselwirkung mit dem Plasma.

Um jene Effekte zu berücksichtigen, die aus dem Nicht-Gleichgewicht der Verunreinigungen resultieren, wurden Ansätze entwickelt, die eine Fluidmodellierung des Hauptplasmas mit einer kinetischen Modellierung, d. h. Lösung der allgemeineren kinetischen Gleichungen, für die Verunreinigungen verknüpfen. Insbesondere haben sich Monte-Carlo-Methoden, die durch eine numerische Simulation von Zufallsprozessen eine statistische Annäherung an die Lösung komplizierter mehrdimensionaler Gleichungen gestatten, im Zuge der Entwicklung leistungsfähiger Rechenmaschinen, als robuste und flexible (und oftmals einzig anwendbare) Verfahren für die kinetische Modellierung etabliert.

Besonders hervorzuheben ist im Zusammenhang mit den beabsichtigten praktischen Rechnungen für realistische Tokamakkonfigurationen der Code DIVIMP, der vor bereits über zehn Jahren von P. C. Stangeby entwickelt wurde. Hierin wird eine Monte-Carlo-Prozedur benutzt, um die Bewegung von Verunreinigungen im zweidimensionalen Poloidalschnitt eines stationären Tokamakplasmas numerisch zu simulieren, dessen Hauptplasma-Parameter einer fluidtheoretischen Modellierung entstammen. Die Trajektorien der Verunreinigungsteilchen werden im DIVIMP-Code durch sukzessive Konstruktion über kleine Zeitschritte numerisch verfolgt und ausgewertet, um räumliche Profile der Dichte, der mittleren Energie und weiterer Parameter der Verunreinigungen zu ermitteln. In diesen Rechnungen werden die Bewegung geladener Verunreinigungen entlang der Magnetfeldlinien, die Coulomb-Streuung an Hintergrundteilchen und ein anomaler diffusiver Transport senkrecht zu den magnetischen Flußflächen modelliert. Außerdem werden Ionisations- und Rekombinationsprozesse einbezogen, und es besteht die Möglichkeit, komplexe räumliche Quellverteilungen und Randbedingungen zu berücksichtigen.

Trotz breiter Verwendung stand aber eine tiefere Begründung des Simulationsalgorithmus, der sich eher auf Plausibilitätsargumente stützte, aus. Man befand sich daher in der merkwürdigen Situation, einen Lösungsalgorithmus anzuwenden, ohne die Gleichungen zu kennen, die gelöst wurden.

Die Aufgabe der vorliegenden Arbeit war deshalb zunächst die Analyse des numerischen Algorithmus des Monte-Carlo-Codes DIVIMP, um die Verbindung zu einem diskutierbaren plasmaphysikalischen Modell herzustellen. Es zeigte sich, daß die Simulation des Verunreinigungstransports einer numerischen Konstruktion stochastischer Prozesse entspricht, die kinetischen Gleichungen der Plasmaphysik äquivalent sind. Das der Simulation zugrundeliegende Transportmodell erwies sich aber als lückenhaft, insofern als diverse Elemente der Driftbewegung der Ionen im toroidalen Magnetfeld und der Coulomb-Streuung an den gelade-

nen Teilchen des Hauptplasmas ausgelassen wurden. Zudem finden Näherungen Anwendung, die einer fluidtheoretischen Beschreibung des Verunreinigungstransports entliehen sind, womit sich ein Widerspruch zur gewünschten kinetischen Modellierung der Verunreinigungen ergibt.

Um die beabsichtigte numerische Modellierung des kinetischen Verunreinigungstransports in konsistenter Weise mit bestehenden Ansätzen zur Fluidmodellierung des Hauptplasmas zu verknüpfen, wurde daher das Transportmodell des Codes DIVIMP umfassend erweitert, wobei die Neuformulierung aus ersten Prinzipien begründet wird. Diese Darstellung enthält das Modell des Codes DIVIMP als Spezialfall, die Unterschiede werden in dieser Arbeit diskutiert.

Aus dieser theoretischen Analyse ergab sich dann allerdings die Notwendigkeit, einen komplett neuen Monte-Carlo-Code zu entwickeln, der die Aufgabe erfüllt, bestehende Ansätze der Modellierung um eine angemessene kinetische Beschreibung des Verunreinigungstransports zu erweitern. Dieser DORIS genannte Code wird ebenfalls in exemplarischen Anwendungen vorgestellt.

Der Inhalt dieser Arbeit ist wie folgt strukturiert:

In Kapitel 1 wird ein kinetisches Transportmodell für Verunreinigungen vorgeschlagen und aus grundlegenden Prinzipien hergeleitet.

Nach einer Darstellung elementarer Tatsachen der kinetischen Theorie von Plasmen in Abschnitt 1 wird in Abschnitt 2 für die Verunreinigungen das Testteilchenmodell eingeführt. Es bietet eine Beschreibungsgrundlage für Verunreinigungen, die das Hauptplasma nur geringfügig stören. Hieraus resultiert eine kinetische Gleichung in Fokker-Planck-Form für die Verteilungsfunktion der Verunreinigungen. In Abschnitt 3 wird diese lineare Fokker-Planck-Gleichung auf sogenannte driftkinetische Variablen transformiert. Der Coulomb-Term, der die Wechselwirkung der Verunreinigungen mit Hauptplasmateilchen beschreibt, wird dabei direkt transformiert. Die Annahme einer Verteilungsfunktion der Hauptplasmateilchen in Form einer Maxwell-Verteilung mit einer überlagerten kleinen Störung führt zu neuen Gleichungen für den Coulomb-Term, die bislang nicht aus der Literatur bekannt waren und in dieser Arbeit erstmals vorgestellt werden. Für die Transformation des Liouville-Terms der kinetischen Testteilchengleichung werden Ergebnisse einer Standardprozedur für die Mittelung über den Gyrationwinkel der helikalen Teilchenbahnen um die Magnetfeldlinien benutzt. Hierbei werden diverse Drift-Effekte, die in bisherigen Monte-Carlo-Simulationen vernachlässigt wurden, in das Modell einbezogen. In Abschnitt 4 wird die driftkinetische Gleichung für die Verunreinigungen durch Teilchenquellen und -senken ergänzt, die für eine realistische Modellierung von Tokamakplasmen notwendig sind. In Abschnitt 5 werden Spezifika des in dieser abgeleiteten Modell-Coulomb-Terms untersucht, wobei der Zusammenhang und die Unterschiede zu anderen Modellen, die auf der Fluidnäherung fußen, herausgearbeitet werden und die Notwendigkeit

der durchgehend kinetischen Formulierung gezeigt wird.

In Kapitel 2 werden Fokker-Planck-Gleichungen vom Gesichtspunkt der Theorie stochastischer Prozesse dargestellt.

Nach einer Einführung in die Zusammenhänge markovscher Prozesse und den ihnen korrespondierenden stochastischen Grundgleichungen, wie Master-Gleichung, Fokker-Planck-Gleichung und Liouville-Gleichung, in Abschnitt 1, wird in den Abschnitten 2 und 3 gezeigt, auf welche Weise die numerische Simulation stochastischer Prozesse zur Lösung spezieller Fokker-Planck-Gleichungen, wie sie in der Plasmaphysik auftauchen, genutzt werden kann. Praktische Beispiele unterschiedlicher Schwierigkeitsgrade demonstrieren die Leistungsfähigkeit der Methode. In den Abschnitten 4 und 5 wird der Monte-Carlo-Algorithmus vervollständigt, um ihn zur Lösung einer erweiterten Klasse von Differentialgleichungen (Kombinationen aus Fokker-Planck- und Master-Gleichungen) anwendbar zu machen. Die theoretischen Konzepte und die vorgestellten Algorithmen dieses Kapitels bilden die Grundlage für die numerische Lösung der in Kapitel 1 hergeleiteten Modellgleichungen für den Verunreinigungstransport.

Das Kapitel 3 ist exemplarischen Resultaten gewidmet, die mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Code DORIS für TEXTOR-Szenarien berechnet wurden.

Die Abschnitte 1 und 2 gelten der Darstellung der Hauptplasma- und Magnetfeldparameter, die als Eingabeparameter für DORIS dienen. In Abschnitt 3 werden Resultate vorgestellt, die über eine Kopplung an das Code-System B2-EIRENE berechnet wurden. Hierbei dienten Ergebnisse dieses Code-Systems für das Hauptplasma als Eingabeparameter für die Rechnungen. Ein Vergleich berechneter Strahlungsprofile mit qualitativ typischen Ergebnissen aus der Bolometer-Diagnostik in TEXTOR wird vorgenommen. Ein numerischer Vergleich zwischen dem in dieser Arbeit vorgestellten Transportmodell und dem des Codes DIVIMP liefert signifikant unterschiedliche Ergebnisse für die verschiedenen Ansätze in der Beschreibung der Coulomb-Streuung der Verunreinigungen an den Hauptplasmateilchen. Die Ergebnisse dieses Abschnitts unterstreichen die Wichtigkeit der hier vorgenommenen Erweiterungen des Transportmodells für die Verunreinigungen gegenüber bisherigen Ansätzen. Für weitere Berechnungen von Strahlungsprofilen von Kohlenstoff und Neon in Abschnitt 3 wurde ein selbstentwickeltes semiempirisches Modell für das Hauptplasma in TEXTOR benutzt. Den Abschluß des dritten Kapitels bildet eine kritische Bewertung des quantitativen Gehalts der numerischen Ergebnisse.

Teile dieser Arbeit wurden bereits in

“Eine Monte-Carlo-Methode zur Untersuchung von Verunreinigungen in

Tokamak-Plasmen“, Jül-3173, KFA-Jülich Report, Jan. 1996
veröffentlicht.

Kapitel 1

Ein driftkinetisches Testteilchenmodell für den Transport von Verunreinigungen

1.1 Kinetische Gleichung für Transportprozesse in vollionisierten Plasmen

Zur theoretischen Beschreibung des Vielteilchensystems Plasma bedient man sich bei verdünnten Plasmen des statistischen Konzepts der Einteilchen-Verteilungsfunktion. Diese Verteilungsfunktion sei mit $f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ bezeichnet. Sie stellt eine Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum dar, derart, daß $f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, daß ein Teilchen der Spezies α zur Zeit t im Volumenelement $d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ bei $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ angetroffen wird. Es gilt also die Normierung

$$\int f_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x}d\mathbf{v} = 1 \quad . \quad (1.1)$$

Eine oft benutzte Form für die Bestimmungsgleichung (kinetische Gleichung) der Verteilungsfunktion ist (Hinton 1983)

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{v} f_\alpha) + \frac{Z_\alpha e}{m_\alpha} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} ((\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) f_\alpha) = \sum_\beta C_{\alpha\beta}(f_\alpha, f_\beta) \quad . \quad (1.2)$$

Hierin sind $Z_\alpha e$ und m_α die Ladung bzw. die Masse der Teilchen der Spezies α . $\mathbf{E}$ und $\mathbf{B}$ bezeichnen das wirksame elektrische bzw. magnetische Feld, definiert durch

$$\begin{aligned}
\nabla \mathbf{D} &= \varrho \quad ; \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\
\nabla \mathbf{B} &= 0 \quad ; \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad ,
\end{aligned}
\tag{1.3}$$

mit $\mathbf{D} = \varepsilon_r \varepsilon_0 \mathbf{E}$ und $\mathbf{B} = \mu_r \mu_0 \mathbf{H}$. Dabei sind ε_0 und μ_0 die elektrische bzw. magnetische Feldkonstante, ε_r die relative Dielektrizitätskonstante und μ_r die relative Permeabilität. Der Anteil des Plasmas an der Ladungsdichte ϱ und der Stromdichte $\mathbf{j}$ ist durch

$$\begin{aligned}
\varrho_m &= \sum_{\alpha} Z_{\alpha} e \int N_{\alpha} f_{\alpha} d\mathbf{v} \\
\mathbf{j}_m &= \sum_{\alpha} Z_{\alpha} e \int N_{\alpha} \mathbf{v} f_{\alpha} d\mathbf{v}
\end{aligned}
\tag{1.4}$$

gegeben (m steht für mikroskopisch). N_{α} bezeichnet dabei die Anzahl von Teilchen der Spezies α im Plasma.

Die Terme $C_{\alpha\beta}$ auf der rechten Seite der kinetischen Gleichung (1.2) beschreiben die Coulomb-Wechselwirkung der Spezies α mit der Spezies β . In dieser Arbeit verwenden wir die Wechselwirkungsterme in der sogenannten Fokker-Planck-Form

$$C_{\alpha\beta} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_{\alpha i}} (K_i^{\alpha\beta} f_{\alpha}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} (D_{ik}^{\alpha\beta} f_{\alpha}) \quad . \tag{1.5}$$

Hierin sind $K_i^{\alpha\beta}$ und $D_{ik}^{\alpha\beta}$ die Drift- bzw. Diffusionskoeffizienten. Sie sind Funktionale der Verteilungsfunktion f_{β} , und es gilt

$$\begin{aligned}
K_i^{\alpha\beta} &= \left(1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}}\right) \Lambda \frac{\partial \phi_{\beta}(\mathbf{v}_{\alpha})}{\partial v_{\alpha i}} \\
D_{ik}^{\alpha\beta} &= \Lambda \frac{\partial^2 \psi_{\beta}(\mathbf{v}_{\alpha})}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} \quad .
\end{aligned}
\tag{1.6}$$

Dabei sind die Trubnikov-Potentiale (Trubnikov 1965) ϕ_{β} und ψ_{β} hier¹ folgendermaßen definiert

¹Trubnikov definierte sie mit anderen Vorfaktoren:

$$\begin{aligned}
\phi_{\beta}(\mathbf{v}_{\alpha}) &= -\frac{1}{4\pi} \int \frac{f_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta})}{|\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{v}_{\beta}|} d\mathbf{v}_{\beta} \\
\psi_{\beta}(\mathbf{v}_{\alpha}) &= -\frac{1}{8\pi} \int |\mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{v}_{\beta}| f_{\beta}(\mathbf{v}_{\beta}) d\mathbf{v}_{\beta} \quad .
\end{aligned}$$

$$\phi_\beta(\mathbf{v}_\alpha) = \int \frac{f_\beta(\mathbf{v}_\beta)}{|\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta|} d\mathbf{v}_\beta \quad (1.7)$$

$$\psi_\beta(\mathbf{v}_\alpha) = \int |\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta| f_\beta(\mathbf{v}_\beta) d\mathbf{v}_\beta$$

und Λ ist ein numerischer Faktor

$$\Lambda = \lambda \frac{Z_\alpha^2 Z_\beta^2 e^4}{4\pi \varepsilon_0^2 m_\alpha^2} n_\beta \quad (1.8)$$

mit der Dichte n_β der Teilchen β und dem Coulomb-Logarithmus λ , der durch

$$\lambda = \int_0^{b_{max}} \frac{b}{b_\perp^2 + b^2} db = \ln \left(\frac{\sqrt{b_{max}^2 + b_\perp^2}}{b_\perp} \right) \approx \ln \left(\frac{b_{max}}{b_\perp} \right) \quad (1.9)$$

gegeben ist. b ist der Stoßparameter für Zweier-Coulombstöße. Der Coulomb-Logarithmus tritt auf, weil die Wechselwirkungsintegrale, die zur Herleitung der Koeffizienten (1.6) gelöst werden müssen, eine logarithmische Divergenz aufweisen, wenn der Stoßparameter b gegen Unendlich (der Streuwinkel gegen Null) geht (Montgomery und Tidman 1964, Trubnikov 1965). Dies hat seine Ursache in der $1/r$ -Skalierung des Coulomb-Wechselwirkungspotentials. Um diese Divergenz zu umgehen, wird z. B. ein maximaler Stoßparameter b_{max} (ein minimaler Streuwinkel) eingeführt, der üblicherweise in der Größenordnung des Debye-Radius gewählt wird (Abschirmeffekt). $b_\perp$ ist der Stoßparameter, der einem Streuwinkel von $\pi/2$ entspricht. Zwischen den Koeffizienten $K_i^{\alpha\beta}$ und $D_{ik}^{\alpha\beta}$ gilt die Beziehung

$$\begin{aligned} K_i^{\alpha\beta} &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right) \sum_k \frac{\partial}{\partial v_{\alpha k}} (D_{ik}^{\alpha\beta}) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{m_\alpha}{m_\beta} \right) \sum_k \frac{\partial}{\partial v_{\alpha i}} (D_{kk}^{\alpha\beta}) \quad . \end{aligned} \quad (1.10)$$

Definiert man nun

$$U_{ik} = \frac{\partial^2}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} |\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta| \quad (1.11)$$

und berücksichtigt die Beziehungen (Trubnikov 1965, Abschnitt 6)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)}{\partial v_{\alpha i}} &= \frac{1}{2} \sum_k \int U_{ik} \frac{\partial f_\beta(\mathbf{v}_\beta)}{\partial v_{\beta k}} d\mathbf{v}_\beta \\ \frac{\partial^2 \psi_\beta(\mathbf{v}_\alpha)}{\partial v_{\alpha i} \partial v_{\alpha k}} &= \int U_{ik} f_\beta(\mathbf{v}_\beta) d\mathbf{v}_\beta \quad , \end{aligned} \quad (1.12)$$

so läßt sich (1.5) in der folgenden, als Landau-Integral bekannten Form schreiben

$$C_{\alpha\beta} = -\frac{m_\alpha}{2}\Lambda \sum_i \frac{\partial}{\partial v_{\alpha i}} \sum_k \int U_{ik} \left(\frac{f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha)}{m_\beta} \frac{\partial f_\beta(\mathbf{v}_\beta)}{\partial v_{\beta k}} - \frac{f_\beta(\mathbf{v}_\beta)}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha(\mathbf{v}_\alpha)}{\partial v_{\alpha k}} \right) d\mathbf{v}_\beta \quad . \quad (1.13)$$

Der Fokker-Planck-Term (1.5) (bzw. das Landau-Integral (1.13)) besitzt einige wichtige und vom physikalischen Gesichtspunkt wünschenswerte Eigenschaften (Montgomery und Tidman 1964, Hinton 1983). Betrachtet man nämlich die kinetische Gleichung (1.2) unter alleiniger Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} = \sum_\beta C_{\alpha\beta}(f_\alpha, f_\beta) \quad ,$$

so gilt:

(i) Positivität der Verteilungsfunktion f_α :

$$f_\alpha \geq 0 \text{ für } t = 0 \rightarrow f_\alpha \geq 0 \text{ für } t > 0$$

(ii) Teilchenerhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f_\alpha d\mathbf{v} = 0$$

(iii) Impulserhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_\alpha \int m_\alpha \mathbf{v} f_\alpha d\mathbf{v} = 0$$

(iv) Energieerhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_\alpha \int \frac{1}{2} m_\alpha \mathbf{v}^2 f_\alpha d\mathbf{v} = 0$$

(v) H-Theorem:

Das Funktional

$$H = \sum_\alpha \int f_\alpha \ln f_\alpha d\mathbf{v}$$

kann zeitlich nicht anwachsen (H ist proportional zur negativen Entropie, das H-Theorem ist die gaskinetische Formulierung des 2. Hauptsatzes der Thermodynamik). Als Folge hieraus ergibt sich, daß die zeitunabhängigen Lösungen für die f_α Maxwell-Verteilungen sind

$$f_\alpha = \left(\frac{m_\alpha}{2\pi T} \right)^{3/2} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{m_\alpha}{T} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 \right)$$

mit gleicher Temperatur T und Strömungsgeschwindigkeit v_0 für alle Spezies α .

Die hier verwendete Form (1.2) der kinetischen Gleichung mit den Ausdrücken (1.5) oder (1.13) für den Stoßanteil läßt sich auf verschiedenen Wegen ableiten und begründen. Landau (Landau 1936) leitete die Form (1.13) für den Coulomb-Term aus dem Boltzmann-Stoßterm ab, indem er nur Kleinwinkelstreuung betrachtete und die oben erwähnte Beschränkung der Integrale bezüglich des Stoßparameters verwendete. Obgleich der Boltzmann-Stoßterm ursprünglich ein Gas beschreibt, das ausschließlich Zweierstoß-Wechselwirkung aufweist, kann er aber für ein Plasma aus geladenen Teilchen benutzt werden, wenn Effekte infolge von Dreiteilchen-Korrelationen sowie der Einfluß dritter (unabhängiger) Teilchen auf Zweierstöße vernachlässigbar sind. Eine etwas elementarere Herleitung des Stoßterms (1.5) wurde von Rosenbluth et al. angegeben, die die Analogie zwischen der Diffusion der Plasmateilchen im Geschwindigkeitsraum und Brownscher Bewegung ausnutzten. Die Annahme wiederum von Zweierstößen führt auf obige Ausdrücke (1.6) für die Drift- und Diffusionskoeffizienten (Rosenbluth 1957, Trubnikov 1965). Eine detailliertere Ableitung der Landau-Fokker-Planck-Gleichung aus grundlegenden Prinzipien ist zum Beispiel bei Nicholson (Nicholson 1983, Kapitel 5) oder bei Ecker (Ecker 1972, Kapitel 4) angegeben. Nicholson leitet die Lenard-Balescu-Gleichung (Lenard 1960, Balescu 1960) aus der BBGKY-Hierarchie (Bogoliubov 1946, Born und Green 1949, Kirkwood 1946, Yvon 1935) ab, die sich wiederum aus der exakt gültigen Liouville-Gleichung ergibt (Klimontovich 1964). Die Fokker-Planck-Gleichung folgt bei ihm als Spezialfall der Lenard-Balescu-Gleichung. Ecker demonstriert, wie sich die Fokker-Planck-Gleichung ohne Umweg über die Lenard-Balescu-Gleichung aus der BBGKY-Hierarchie ergibt. Diese Herleitungen, ausgehend von der exakt gültigen Liouville-Gleichung für das vollionisierte Plasma geben Auskunft über den Gültigkeitsbereich der Landau-Fokker-Planck-Gleichung. Auf die Darstellung dieser umfangreichen Analysen und nicht-trivialen mathematischen Zusammenhänge soll hier verzichtet werden. In stark vereinfachender Weise wird nur festgehalten, daß die von uns angesetzte Form der kinetischen Gleichung eine gute Beschreibungsgrundlage liefert, wenn die Plasmateilchen nur schwach korreliert sind (die Stoßprozesse ähneln Zweierstößen) und die räumlichen Inhomogenitäten in den Verteilungsfunktionen - und damit auch in den Vlasov-Feldern (1.3) - auf einer mittleren freien Weglänge der Teilchen nur klein sind (typische Gradientenlängen im Plasma sind groß im Vergleich zur mittleren freien Weglänge).

Obwohl die Gleichungen (1.2), (1.3) und (1.5) den Ausgangspunkt zahlreicher Untersuchungen bilden, ist es aufgrund ihrer Komplexität bisher nur für spezielle Probleme gelungen, Näherungslösungen zu finden. Das allgemeine Problem gilt bis heute als analytisch und numerisch unlösbar. Im nächsten Abschnitt soll gezeigt werden, wie auf der Grundlage der in diesem Abschnitt vorgestellten

kinetischen Beschreibung für das gesamte Plasma ein Transportmodell für Verunreinigungen abgeleitet werden kann.

1.2 Testteilchenmodell für Verunreinigungen in Fluid-Plasmen

Die vorliegende Arbeit befaßt sich vornehmlich mit Verunreinigungen in der Randschicht von Tokamak-Plasmen. In vielen praktisch interessierenden Fällen kann dabei angenommen werden, daß die Verunreinigungsteilchen eine nur kleine Störung im System des Hintergrundplasmas (Deuteriumionen und Elektronen) ausmachen. Vernachlässigt man diese Störung und nimmt weiterhin an, daß die Wechselwirkung der Verunreinigungsteilchen untereinander vernachlässigbar ist, so kann man diese Teilchen im sogenannten Testteilchen-Modell betrachten: die Testteilchen „spüren“ den Hintergrund (Coulomb-Kräfte), stören aber nicht dessen Verteilung. Auf diese Weise läßt sich eine einzelne lineare Fokker-Planck-Gleichung aus dem System gekoppelter kinetischer Gleichungen (1.2) separieren

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{v} f) + \frac{Ze}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} ((\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) f) = C(f, f_b) \quad . \quad (1.14)$$

Hierin wurden die griechischen Indizes weggelassen. f steht für die Verteilungsfunktion der Verunreinigungsteilchen und der Index b bezeichnet Hintergrundgrößen. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit wird hier die Wechselwirkung mit nur einer Hintergrundspezies (der D^+ -Ionen) betrachtet. Gemäß der Testteilchen-Annahme trägt nur das Hintergrundplasma zu den Feldern $\mathbf{E}$ und $\mathbf{B}$ bei. Um die Gleichung (1.14) für die Testteilchen vollständig festzulegen, ist die Kenntnis der Hintergrundverteilungsfunktion notwendig, die die Berechnung der Felder $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ und der Drift- und Diffusionskoeffizienten des Coulomb-Terms erlaubt. Im weiteren wird angenommen, daß die Gleichungen für das Hintergrundplasma anderweitig gelöst wurden und wir Kenntnis über die Hintergrundparameter in Gleichung (1.14) haben. Dies spiegelt unsere praktische Vorgehensweise wider: Die numerischen Rechnungen für das Hauptplasma werden mit Hilfe eines Fluid-Codes wie SOLXY (Gerhauser und Claßen 1987) oder dem Code B2-EIRENE durchgeführt, der ein Fluid-Modell für die geladenen Hauptplasmateilchen (B2-Code, Braams 1987) und ein kinetisches Neutralgas-Modell (EIRENE-Code, Reiter 1992 (a)) verknüpft. Die Kopplung dieser beiden Ansätze wurde von Reiter durchgeführt und dokumentiert (Reiter 1992 (b)). Die Resultate aus diesen Rechnungen dienen dann als Bestimmungsparameter für die kinetische Gleichung (1.14) der Verunreinigungsteilchen.

Die angesprochenen hydrodynamischen Methoden (Fluid-Methoden) für das Hintergrundplasma fußen auf der Annahme der Nähe zu einem lokalen Gleichgewicht

in einem stoßbestimmten Plasma. Die Verteilungsfunktionen werden deshalb in Form einer Maxwell-Verteilung mit kleiner Störung angesetzt (Balescu 1988)

$$\begin{aligned}
 f_\alpha(\mathbf{v}, t) &= \left(\frac{2\pi T_\alpha}{m_\alpha} \right)^{-3/2} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{m_\alpha}{T_\alpha} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 \right) \cdot (1 + \eta(\mathbf{v}, t)) \\
 &= f_\alpha^0(\mathbf{v}, t) \cdot (1 + \eta(\mathbf{v}, t)) \quad \text{mit} \quad |\eta(\mathbf{v}, t)| \ll 1 \quad .
 \end{aligned}
 \tag{1.15}$$

f_α^0 ist darin die ungestörte Maxwell-Verteilung, die durch die Parameter T_α und $\mathbf{v}_0$ festgelegt ist (Temperatur und mittlere Strömungsgeschwindigkeit, die außerdem Funktionen des Ortes $\mathbf{x}$ sind). Die Störung $\eta(\mathbf{v})$ wird so angesetzt, daß sie proportional zu den Inhomogenitäten (Temperaturgradienten etc.) der Plasma-parameter ist. Dieser Ansatz ermöglicht die Schließung des zunächst unendlichen gekoppelten Gleichungssystems, das sich durch Bildung der Momente der Gleichungen (1.2) ergibt (jede Momentengleichung enthält das nächsthöhere Geschwindigkeitsmoment).

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial n_\alpha}{\partial t} &= \int N_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} d\mathbf{v} \\
 \frac{\partial \langle \mathbf{v}_\alpha \rangle}{\partial t} &= \int \mathbf{v} \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} d\mathbf{v} \\
 \frac{\partial \langle \mathbf{v}_\alpha^2 \rangle}{\partial t} &= \int \mathbf{v}^2 \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} d\mathbf{v} \\
 &\vdots
 \end{aligned}
 \tag{1.16}$$

usw.

Je nach Anzahl der Momente, die in die funktionale Form von $\eta(\mathbf{v})$ einbezogen werden, benennt man die Approximation (1.15) als 13-Momente-, 21-Momente, 29-Momente-Entwicklung usf. (Balescu 1988, Kapitel 4). Die Integration über die Geschwindigkeitskoordinaten und die Schließung der Momentengleichungen (1.16) führen auf ein endliches System von gekoppelten Differentialgleichungen zu deren Lösung effiziente numerische Methoden zur Verfügung stehen (siehe z. B. Patankar 1980). Dies macht den Vorteil der Fluid-Methoden in der Transport-Theorie aus. Ein häufig verwendetes System bilden zum Beispiel die Braginski-Gleichungen (Braginski 1965), die allerdings nicht auf einer Momenten-Methode wie hier angesprochen beruhen, sondern auf einem modifizierten Chapman-Enskog-Ansatz (Chapman und Cowling 1960). Die Annahme einer nur wenig von einer Maxwell-Verteilung abweichenden Verteilung der Teilchen im Geschwindigkeitsraum schränkt aber den Gültigkeitsbereich von Fluid-

Modellen ein. So sind beispielsweise die uns interessierenden Verunreinigungsionen oftmals sehr kurzlebig, denn Verunreinigungen, die durch Zerstäubung von Wandmaterialien oder ähnlichen Prozessen als Neutralteilchen in die Plasmarandschicht eindringen, werden so schnell in die höchsten Ladungszustände ionisiert, daß die niedrigen Ladungszustände nicht eine Maxwell-Verteilung annehmen können. Auch wird in Fluid-Modellen für Multi-Spezies-Plasmen aufgrund numerischer Schwierigkeiten häufig die Annahme gemacht, daß alle Ionensorten die gleiche lokale Temperatur besitzen. Die Kurzlebigkeit der unteren Ladungszustände der Verunreinigungen verhindert aber auch einen Energieausgleich, so daß die „Temperatur“ (mittlere thermische Energie) für die meisten Ionen sehr unterschiedlich sein kann.

Die eben geschilderten Gründe für die Zweifelhaftigkeit der Fluid-Modelle für Verunreinigungen motivierten zu der in dieser Arbeit verwendeten Kombination aus Fluid-Modellen für das Hauptplasma und der kinetischen Beschreibung von Verunreinigungsionen. Dies bedeutet, wir verwenden eine gestörte Maxwell-Verteilung als Ansatz für die Hintergrundteilchen, deren Parameter zuvor in einer separaten Rechnung ermittelt wurden, und bestimmen damit die kinetische Gleichung (1.14) für die Verteilungsfunktion der Verunreinigungsionen.

1.3 Übergang zur driftkinetischen Beschreibung

Wie in Kapitel 2 gezeigt wird, könnte die Monte-Carlo-Methode, die wir zur Lösung der kinetischen Gleichungen für die Verunreinigungen auswählten, auch auf die kinetische Testteilchengleichung (1.14) angewendet werden. Doch ergeben sich dabei Probleme mit den stark unterschiedlichen Zeitskalen für die Bewegung der geladenen Teilchen. So führt die Lorentz-Kraft, die auf der linken Seite von (1.14) auftritt, zu einer sehr schnellen Gyration der Teilchen um die Magnetfeldlinien (typische Zeitskala $\sim 10^{-8}$ s für übliche Verhältnisse in Tokamaks), wohingegen die Bewegung entlang der Feldlinien auf einer um Größenordnungen unterschiedlichen Zeitskala stattfindet ($\sim 10^{-4}$ s), und die Coulomb-Stöße eine typische Zeitskala im mittleren Bereich ($\sim 10^{-6} - 10^{-7}$ s) aufweisen. Die Zeitskalen der Transport-Gleichung sind aber von entscheidender Bedeutung für die numerische Prozedur, die auf einer Konstruktion der Trajektorien im Phasenraum über Zeitintervalle ~ 1 s beruht (bei den von uns angestrebten Berechnungen für die Plasmarandschicht). Die vollständige Berücksichtigung der Details der Gyrationbewegung würde einen unakzeptablen Rechenaufwand erfordern (es sei denn, man beschränkt das Problem, z. B. durch Reduzierung des Rechengebietes, wie es im ERO-Code getan wurde (Kögler 1997)). Praktische Rechnungen, die auf der Gleichung (1.14) beruhen, werden deshalb in dieser Arbeit nicht vorgestellt.

Hier entschlossen wir uns, zu einer sogenannten driftkinetischen Beschreibung des Ionentransportes überzugehen. Hierunter versteht man eine Beschreibung der Ionenbewegung, in der in geeigneter Weise die schnelle Gyrationbewegung beseitigt wird und die folgenden Variablen eingeführt werden: die Guiding-Center-Position $\mathbf{R}$, die in etwa die mittlere Position eines gyrierenden Teilchens im Ortsraum angibt, und die mittleren Geschwindigkeiten $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$, parallel bzw. senkrecht zum Magnetfeld. Die Herleitung driftkinetischer Transportgleichungen kann auf verschiedenste Weise geschehen (Gardner 1959, Claaßen und Repp 1976, Hazeltine 1977). Unsere konkrete Approximation orientierte sich vornehmlich an der Anwendbarkeit effizienter Standard-Monte-Carlo-Prozeduren zur Lösung von Fokker-Planck-Gleichungen (siehe Kapitel 2), weshalb wir uns bemühten, eine driftkinetische Gleichung in dieser Form abzuleiten. Die Annahmen und Einzelheiten dieser Ableitung werden in den nächsten Abschnitten erläutert.

1.3.1 Allgemeine Transformation des Coulomb-Stoßterms

Die Transformation des Fokker-Planck-Stoßterms wird am einfachsten erreicht, wenn er in eine geeignete tensorielle Form gebracht wird, um den Apparat der Tensoranalysis (Sokolnikoff 1964, Mathews, Walker und Benjamin 1965, Simmonds 1995) nutzen zu können. Der Stoßterm (1.5) mit den Drift- und Diffusionskoeffizienten (1.6) sei in einem kartesischen Koordinatensystem (Referenzsystem im Geschwindigkeitsraum) gegeben durch

$$C(f) = - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left(\left(1 + \frac{m}{m_b} \right) \Lambda \frac{\partial \phi(\mathbf{v})}{\partial v_i} f \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} \left(\Lambda \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{v})}{\partial v_i \partial v_k} f \right) \quad . \quad (1.17)$$

Hier wurde die im Abschnitt 1.2 eingeführte Bezeichnungskonvention für unser Testteilchenmodell verwendet. Der Coulomb-Operator erscheint in diesem Modell als linearer Operator bzgl. der Testteilchen-Verteilungsfunktion f . Nun werden die folgenden kontravarianten Komponenten eingeführt

$$\begin{aligned} T^i &= \sum_l g^{il} \phi_{,l} \\ S^{ik} &= \sum_{l,s} g^{il} g^{ks} \psi_{,ls} \quad , \end{aligned} \quad (1.18)$$

wobei g^{il} die kontravarianten Komponenten des metrischen Tensors sind ($= \delta_{il}$ für kartesische Koordinatensysteme) und $\phi_{,l}$ und $\psi_{,ls}$ die kovarianten Ableitungen

$$\begin{aligned}\phi_{,l} &= \frac{\partial \phi}{\partial v_l} \\ \psi_{,ls} &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_l \partial v_s} - \sum_j \left\{ \begin{matrix} j \\ l \ s \end{matrix} \right\} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial v_j} \end{aligned} \quad (1.19)$$

$\left\{ \begin{matrix} j \\ l \ s \end{matrix} \right\}$ ist das Christoffel-Symbol zweiter Art

$$\left\{ \begin{matrix} j \\ l \ s \end{matrix} \right\} = \sum_{\alpha} g^{j\alpha} \cdot [ls, \alpha] \quad (1.20)$$

mit $[ls, \alpha]$, dem Christoffel-Symbol erster Art

$$[ls, \alpha] = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial g_{l\alpha}}{\partial v_s} + \frac{\partial g_{s\alpha}}{\partial v_l} - \frac{\partial g_{ls}}{\partial v_{\alpha}} \right) \quad (1.21)$$

Die g_{ik} sind die kovarianten Komponenten des metrischen Tensors.

Berücksichtigt man, daß die Verteilungsfunktion f ein relativer Skalar mit Gewicht +1 ist, d. h. , daß

$$\int f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \int \bar{f}(\bar{\mathbf{v}}) d\bar{\mathbf{v}} \quad (1.22)$$

für die Transformation $\mathbf{v} \rightarrow \bar{\mathbf{v}}$ bzw. $\bar{\mathbf{v}} \rightarrow \mathbf{v}$ gilt, so erhält man

$$\begin{aligned}\sum_i (f T^i)_{,i} &= \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} (f T^i) \\ \sum_{i,k} (f S^{ik})_{,ik} &= \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_k \partial v_i} (f S^{ik}) + \sum_{i,k,\alpha} \frac{\partial}{\partial v_k} \left(\left\{ \begin{matrix} k \\ \alpha \ i \end{matrix} \right\} \cdot f S^{i\alpha} \right)\end{aligned} \quad (1.23)$$

und der Coulomb-Term (1.17) kann in der folgenden Form geschrieben werden

$$C(f) = - \sum_i \left(1 + \frac{m}{m_b} \right) \cdot \Lambda \cdot (f T^i)_{,i} + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \Lambda \cdot (f S^{ik})_{,ik} \quad (1.24)$$

(die Christoffel-Symbole verschwinden für kartesische Koordinatensysteme).

Dies ist die gewünschte tensorielle Form für (1.17).

Da die kovarianten Ableitungen (1.19) ebenfalls relative Tensoren mit Gewicht +1 sind, folgt, daß der Stoßterm (1.24) gemäß

$$\bar{C}(\bar{f}) = \left| \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \bar{\mathbf{v}}} \right|^{+1} C(f) \quad (1.25)$$

transformiert, wobei $|\partial \mathbf{v} / \partial \bar{\mathbf{v}}|$ die Jacobi-Determinante der Transformation $\bar{\mathbf{v}} \rightarrow \mathbf{v}$ ist und $\bar{C}(\bar{f})$ durch

$$\bar{C}(\bar{f}) = - \sum_i \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \cdot \Lambda \cdot (\bar{f} \bar{T}^i)_i + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \Lambda \cdot (\bar{f} \bar{S}^{ik})_{ik} \quad (1.26)$$

gegeben ist.

1.3.2 Berechnung der transformierten Drift- und Diffusionskoeffizienten

Die Gleichungen des letzten Abschnitts werden nun benutzt, um den Coulomb-Stoßterm auf die Variablen $(v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi)$ zu transformieren. $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$ sind die Geschwindigkeiten parallel bzw. senkrecht zum Magnetfeld und φ ist der Gyrationwinkel. Um einen von φ unabhängigen Coulomb-Stoßterm in diesen Variablen zu erhalten, ist es notwendig, die Betrachtung auf Situationen zu beschränken, in welchen sowohl die Verteilungsfunktion der Hintergrundteilchen als auch der Testteilchen (im Geschwindigkeitsraum) axialsymmetrisch bzgl. der $v_{\parallel}$ -Achse ist, d. h.

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}, v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi, t) &= f(\mathbf{x}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t) \\ f_b(\mathbf{x}, v_{\parallel}, v_{\perp}, \varphi, t) &= f_b(\mathbf{x}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t) \end{aligned} \quad (1.27)$$

Andernfalls wäre nach der Transformation eine Mittelung über den Gyrationwinkel nötig, um diesen zu eliminieren. Solche Betrachtungen sollen aber in dieser Arbeit noch nicht angestellt werden, sie bilden den Gegenstand zukünftiger Untersuchungen.

Für die Hintergrund-Verteilung f_b wählen wir eine Form, die konsistent ist mit einer hydrodynamischen Beschreibung des D^+ -Elektronen-Plasmas (siehe Abschnitt 1.2)

$$\begin{aligned} f_b(\mathbf{v}, t) &= \left(\frac{2\pi T_b}{m_b}\right)^{-3/2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m_b}{T_b} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_b)^2\right) \cdot (1 + \eta(\mathbf{v}, t)) \\ &= f_b^0(\mathbf{v}, t) \cdot (1 + \eta(\mathbf{v}, t)) \quad , \end{aligned} \quad (1.28)$$

also eine Maxwell-Verteilung f_b^0 mit Störung $\eta \cdot f_b^0$. Die Störfunktion η wird in der folgenden Form approximiert (Balescu 1988)

$$\eta(\mathbf{v}) = \sum_i h_i^{(3)} H_i^{(3)}(\mathbf{v}) + \sum_{i,k} h_{ik}^{(2)} H_{ik}^{(2)}(\mathbf{v}) \quad . \quad (1.29)$$

Dabei sind $H_i^{(3)}(\mathbf{v})$ und $H_{ik}^{(2)}(\mathbf{v})$ irreduzible tensorielle Hermite-Polynome (Abramowitz 1965)

$$\begin{aligned}
H_i^{(3)}(\mathbf{v}) &= \frac{1}{\sqrt{5}} \chi_i (2 \chi^2 - 5) \\
H_{ik}^{(2)}(\mathbf{v}) &= \sqrt{2} \left(\chi_i \chi_k - \frac{1}{3} \chi^2 \delta_{ik} \right)
\end{aligned} \tag{1.30}$$

mit

$$\chi = \alpha (\mathbf{v} - \mathbf{v}_b) \quad ; \quad \alpha = \sqrt{\frac{m_b}{2T_b}} \quad . \tag{1.31}$$

Dieser spezielle Ansatz entspricht der 13-Momente-Entwicklung der hydrodynamischen Theorie. Die Entwicklungskoeffizienten $h_i^{(3)}$ und $h_{ik}^{(2)}$ sind proportional zu makroskopischen Größen des Hintergrundplasmas, die in unserem Modell als bekannt vorausgesetzt wurden.

$$\begin{aligned}
h_i^{(3)} &= \sqrt{\frac{2}{5}} \left(\frac{m_b}{T_b} \right)^{3/2} \frac{1}{m_b n_b} q_i \\
h_{ik}^{(2)} &= \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{1}{n_b T_b} \pi_{ik} \quad .
\end{aligned} \tag{1.32}$$

$\mathbf{q}$ ist der Wärmefluß der Hintergrundspezies (D^+) und $\boldsymbol{\pi}$ deren Viskositätstensor

$$\begin{aligned}
q_i(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{2} m_b \int (v_i - v_{b,i}) |\mathbf{v} - \mathbf{v}_b|^2 N_b f_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \\
\pi_{ik}(\mathbf{x}, t) &= m_b \int \left((v_i - v_{b,i})(v_k - v_{b,k}) - \frac{1}{3} |\mathbf{v} - \mathbf{v}_b|^2 \delta_{ik} \right) N_b f_b(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \quad .
\end{aligned} \tag{1.33}$$

N_b ist die Anzahl der Hintergrundteilchen im betrachteten Systemvolumen. Mit Hilfe dieser funktionalen Form der Verteilungsfunktion f_b werden nun die Trubnikov-Potentiale $\phi(\mathbf{v})$ und $\psi(\mathbf{v})$ gemäß Gleichung (1.7) berechnet. Da uns die Berechnung dieser Potentialfunktionen für Verteilungen, die von Maxwell-Verteilungen abweichen, nicht aus der Literatur bekannt ist, werden unsere Resultate hier ausführlich abgeleitet.

Die Berechnung führt auf die folgenden Integrale, deren Auswertung im Anhang A erläutert wird:

$$\begin{aligned}
I^1(\mathbf{v}) &= \int \frac{f_b^0(\mathbf{v}')}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} d\mathbf{v}' \\
&= \frac{\alpha}{\chi} \Phi(\chi) \\
I^2(\mathbf{v}) &= \int |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| f_b^0(\mathbf{v}') d\mathbf{v}' \\
&= \frac{1}{2\alpha} \Phi'(\chi) + \left(\frac{1}{2\alpha\chi} + \frac{\chi}{\alpha} \right) \Phi(\chi) \\
I_i^3(\mathbf{v}) &= \int \frac{f_b^0(\mathbf{v}') H_i^{(3)}(\mathbf{v}')}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} d\mathbf{v}' \\
&= -\frac{1}{\sqrt{5}} \frac{\chi_i}{\chi} \alpha \chi \Phi'(\chi) \\
I_i^4(\mathbf{v}) &= \int |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| f_b^0(\mathbf{v}') H_i^{(3)}(\mathbf{v}') d\mathbf{v}' \\
&= \frac{\chi_i}{\chi} \left(-\frac{1}{2\sqrt{5}} \frac{1}{\alpha\chi} \Phi'(\chi) + \frac{1}{2\sqrt{5}} \frac{1}{\alpha\chi^2} \Phi(\chi) \right) \\
I_{ik}^5(\mathbf{v}) &= \int \frac{f_b^0(\mathbf{v}') H_{ik}^{(2)}(\mathbf{v}')}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} d\mathbf{v}' \\
&= \left(\delta_{ik} - 3 \frac{\chi_i \chi_k}{\chi^2} \right) \left(\left(\frac{1}{3\sqrt{2}} \alpha + \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\alpha}{\chi^2} \right) \Phi'(\chi) - \frac{1}{2\sqrt{2}} \frac{\alpha}{\chi^3} \Phi(\chi) \right) \\
I_{ik}^6(\mathbf{v}) &= \int |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| f_b^0(\mathbf{v}') H_{ik}^{(2)}(\mathbf{v}') d\mathbf{v}' \\
&= \left(\delta_{ik} - 3 \frac{\chi_i \chi_k}{\chi^2} \right) \left(\frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{1}{\alpha\chi^2} \Phi'(\chi) + \left(\frac{1}{6\sqrt{2}} \frac{1}{\alpha\chi} - \frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{1}{\alpha\chi^3} \right) \Phi(\chi) \right) , \\
\end{aligned} \tag{1.34}$$

wobei wieder

$$\chi = \alpha (\mathbf{v} - \mathbf{v}_b) \quad ; \quad \alpha = \sqrt{\frac{m_b}{2T_b}} \tag{1.35}$$

ist und $\Phi(\chi)$ die Fehler-Funktion bezeichnet

$$\Phi(\chi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\chi e^{-t^2} dt \quad ; \quad \Phi'(\chi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\chi^2} . \quad (1.36)$$

Die gesuchten Trubnikov-Potentiale sind damit

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{v}) &= I^1(\mathbf{v}) + \sum_i h_i^{(3)} I_i^3(\mathbf{v}) + \sum_{i,k} h_{ik}^{(2)} I_{ik}^5(\mathbf{v}) \\ \psi(\mathbf{v}) &= I^2(\mathbf{v}) + \sum_i h_i^{(3)} I_i^4(\mathbf{v}) + \sum_{i,k} h_{ik}^{(2)} I_{ik}^6(\mathbf{v}) . \end{aligned} \quad (1.37)$$

In dieser allgemeinen Form würden die Potentialfunktionen - und damit der Coulomb-Stoßterm - nicht unabhängig vom Gyrationwinkel φ sein. Wir beheben dies durch die folgenden Einschränkungen für die Verteilungsfunktion f_b :

- (i) Die mittlere Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{v}_b$ der Hintergrundionen wird als parallel zum magnetischen Feld angenommen, d. h.

$$\mathbf{v}_b \parallel \mathbf{b} , \quad (1.38)$$

mit dem Richtungsvektor $\mathbf{b} = \mathbf{B}/B$.

- (ii) Der Wärmefluß $\mathbf{q}$ der Ionen wird in der reduzierten Form

$$\mathbf{q} = -\frac{15}{8\sqrt{2\pi}} \frac{16\pi^2 \varepsilon_0^2}{Z_b^4 e^4 \lambda} \frac{T_b^{5/2}}{m_b^{1/2}} \tilde{\kappa}_{\parallel} \mathbf{b} (\mathbf{b} \cdot \nabla T_b) \quad (1.39)$$

betrachtet, mit $\tilde{\kappa}_{\parallel} = 1.0/0.5657$. Dies ist der von Balescu angegebene Wert für die dimensionslose Wärmeleitfähigkeit in der 13-Momente-Näherung (Balescu 1988, Kapitel 5). Somit wird nur der zum Magnetfeld $\mathbf{B}$ parallele Anteil des Wärmeflusses berücksichtigt. Der vollständige Ausdruck für $\mathbf{q}$ ist bei Balescu angegeben.

- (iii) Vom Viskositätstensor $\boldsymbol{\pi}$ berücksichtigen wir nur den folgenden Anteil

$$\pi_{ik} = -\frac{3}{4\sqrt{2\pi}} \frac{16\pi^2 \varepsilon_0^2}{Z_b^4 e^4 \lambda} m_b^{1/2} T_b^{5/2} \tilde{\eta}_{\parallel} \nu_{ik}^{\parallel} , \quad (1.40)$$

mit

$$\boldsymbol{\nu}^{\parallel} = \begin{pmatrix} \nu_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(\nu_{yy} + \nu_{zz}) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}(\nu_{yy} + \nu_{zz}) \end{pmatrix} . \quad (1.41)$$

Hierbei ist die x -Richtung die Richtung des Vektors $\mathbf{b}$ und ν_{ii} ist definiert als

$$\nu_{ii} = 2 \frac{\partial v_{bi}}{\partial x_i} - \frac{1}{3} \nabla \mathbf{v}_b \quad . \quad (1.42)$$

Der dimensionslose Viskositätskoeffizient $\hat{\eta}_{\parallel}$ ist wiederum bei Balescu angegeben als $\hat{\eta}_{\parallel} = 1.0/(1.2 + 0.8485 Z_b^{-1})$. Dort kann ebenfalls der vollständige Ausdruck für π_{ik} gefunden werden.

Die genannten Einschränkungen führen zu den folgenden Ausdrücken für die Entwicklungskoeffizienten in (1.29)

$$\begin{aligned} h_x^{(3)} &= -\frac{3\sqrt{5}}{8\sqrt{\pi}} \frac{16\pi^2 \varepsilon_0^2}{Z_b^4 e^4 \lambda} \tilde{\kappa}_{\parallel} \frac{T_b}{n_b} \nabla_{\parallel} T_b \\ h_{xx}^{(2)} &= -\frac{3}{8\sqrt{\pi}} \frac{16\pi^2 \varepsilon_0^2}{Z_b^4 e^4 \lambda} \hat{\eta}_{\parallel} \frac{m_b^{1/2} T_b^{3/2}}{n_b} \left(-\frac{1}{3} \nabla \mathbf{v}_b + 2 \nabla_{\parallel} v_{b\parallel} \right) \\ h_{yy}^{(2)} = h_{zz}^{(2)} &= -\frac{3}{8\sqrt{\pi}} \frac{16\pi^2 \varepsilon_0^2}{Z_b^4 e^4 \lambda} \hat{\eta}_{\parallel} \frac{m_b^{1/2} T_b^{3/2}}{n_b} \left(\frac{2}{3} \nabla \mathbf{v}_b - \nabla_{\parallel} v_{b\parallel} \right) \quad . \end{aligned} \quad (1.43)$$

Alle übrigen Komponenten von $h_i^{(3)}$ und $h_{ik}^{(2)}$ sind in diesem Koordinatensystem (x -Richtung parallel zu $\mathbf{B}$) gleich Null. Setzt man die Koeffizienten (1.43) in die Gleichungen (1.37) für die Trubnikov-Potentiale ein, erhält man

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{v}) &= \phi_0(\chi) + C_1 \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \phi_1(\chi) + C_2 \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \right) \phi_2(\chi) \\ \psi(\mathbf{v}) &= \psi_0(\chi) + C_1 \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \psi_1(\chi) + C_2 \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \right) \psi_2(\chi) \end{aligned} \quad (1.44)$$

mit

$$\begin{aligned} C_1 &= -\frac{1}{\sqrt{5}} h_x^{(3)} \\ C_2 &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(h_{xx}^{(2)} - \frac{1}{2} (h_{yy}^{(2)} + h_{zz}^{(2)}) \right) \quad . \end{aligned} \quad (1.45)$$

Die Potentialfunktionen (1.44) sind nun nur noch Funktionen von $\chi_{\parallel}$ und $\chi_{\perp}$, den Anteilen von χ parallel bzw. senkrecht zur Richtung von $\mathbf{v}_b$ (bzw. $\mathbf{B}$), und unabhängig vom Gyrationswinkel φ . Die $\phi_0, \phi_1, \dots, \psi_2$ sind Funktionen vom

Betrag χ und im Anhang B angegeben.
Für die neuen Variablen

$$\bar{v}_1 = v_{\parallel} \quad ; \quad \bar{v}_2 = v_{\perp} \quad ; \quad \bar{v}_3 = \varphi \quad (1.46)$$

lauten die metrischen Tensoren

$$\bar{g}_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & v_{\perp}^2 \end{pmatrix} \quad ; \quad \bar{g}^{ik} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & v_{\perp}^{-2} \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

und die einzigen von Null verschiedenen Christoffel-Symbole zweiter Art sind

$$\overline{\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \, 3 \end{pmatrix}} = -v_{\perp} \quad ; \quad \overline{\begin{pmatrix} 3 \\ 2 \, 3 \end{pmatrix}} = \overline{\begin{pmatrix} 3 \\ 3 \, 2 \end{pmatrix}} = \frac{1}{v_{\perp}} \quad (1.48)$$

Aus den Gleichungen (1.18), (1.19) und (1.44) folgt dann (da $\partial\phi/\partial\varphi$ und $\partial\psi/\partial\varphi$ verschwinden)

$$\bar{T}^i = \begin{pmatrix} \frac{\partial\phi}{\partial v_{\parallel}} \\ \frac{\partial\phi}{\partial v_{\perp}} \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \bar{S}^{ik} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2\psi}{\partial v_{\parallel}^2} & \frac{\partial^2\psi}{\partial v_{\parallel}\partial v_{\perp}} & 0 \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial v_{\perp}\partial v_{\parallel}} & \frac{\partial^2\psi}{\partial v_{\perp}^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{v_{\perp}^3} \frac{\partial\psi}{\partial v_{\perp}} \end{pmatrix} . \quad (1.49)$$

Die Ableitungen der Potentialfunktionen sind ebenfalls im Anhang B aufgeführt.
Für den Coulomb-Term ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned} \bar{C}(\bar{f}) &= -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (K_{\parallel} \bar{f}) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (K_{\perp} \bar{f}) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} (D_{\parallel\parallel} \bar{f}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}\partial v_{\perp}} (D_{\parallel\perp} \bar{f}) \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}\partial v_{\parallel}} (D_{\perp\parallel} \bar{f}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} (D_{\perp\perp} \bar{f}) \end{aligned} \quad (1.50)$$

mit

$$\bar{f} = v_{\perp} f(v_{\parallel}, v_{\perp}, t) \quad (1.51)$$

($v_{\perp}$ ist die Jacobi-Determinante der Transformation) und den Drift- und Diffusionskoeffizienten

$$\begin{aligned}
K_{\parallel} &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \frac{\partial \phi}{\partial v_{\parallel}} \quad ; \quad K_{\perp} = \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \frac{\partial \phi}{\partial v_{\perp}} + \frac{1}{2} \Lambda \frac{1}{v_{\perp}^2} \frac{\partial \psi}{\partial v_{\perp}} \\
D_{\parallel\parallel} &= \Lambda \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\parallel}^2} \quad ; \quad D_{\parallel\perp} = \Lambda \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} \\
D_{\perp\parallel} &= \Lambda \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} \quad ; \quad D_{\perp\perp} = \Lambda \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\perp}^2}
\end{aligned} \tag{1.52}$$

1.3.3 Driftkinetische Approximation des Liouville-Terms

Im Gegensatz zur direkten Transformation des Coulomb-Terms im letzten Abschnitt, wo wir die Abhängigkeit vom Gyrationwinkel φ durch gewisse Annahmen über die Symmetrie der Verteilungsfunktionen im Geschwindigkeitsraum eliminierten, nutzen wir für die driftkinetische Form des Liouville-Terms (linke Seite der kinetischen Testteilchengleichung (1.14)) die Ergebnisse von Sivukhin (Sivukhin 1965). Sivukhin leitete Ausdrücke für die Zeitableitungen der driftkinetischen Variablen ab (Bewegungsgleichungen), indem er die schnelle Gyrationbewegung der geladenen Teilchen durch eine Mittelungsprozedur beseitigte. Für Einzelheiten dieser Methode sei auf die Originalarbeit verwiesen. An dieser Stelle soll nur angemerkt werden, daß die wesentliche Voraussetzung für die Anwendbarkeit seiner Methode darin besteht, daß das Verhältnis $\varepsilon = \varrho_L/L_H$ des Larmor-Radius ϱ_L und der Gradientenlänge L_H der Inhomogenitäten des magnetischen Feldes klein ist. Dies gewährleistet, daß die Gyration der Teilchen auf einer weitaus kleineren Zeitskala stattfindet, als die Bewegung entlang der magnetischen Feldlinien. Geht man davon aus, daß alle makroskopischen Gradientenlängen von derselben Größenordnung sind, so kann

$$\varepsilon = \varrho_L \frac{|\nabla B|}{B} = \frac{v_{\perp} |\nabla B|/B}{|\Omega|} \tag{1.53}$$

für Abschätzungen in praktischen Rechnungen dienen. $\Omega = ZeB/m$ ist dabei die Larmor-Frequenz der Testteilchen. Diese Bedingung kann auch so interpretiert werden, daß $|\Omega|$ sehr groß ist im Vergleich zur Frequenz $v_{\perp} |\nabla B|/B$ (die ein Maß ist für die Stärke der räumlichen Inhomogenitäten des Magnetfeldes, die pro Zeiteinheit durchlaufen werden). Dies werden wir uns in der folgenden Darstellung zunutze machen, indem wir die Größenordnung der verschiedenen Terme in den Resultaten von Sivukhin mit Hilfe der Ersetzung

$$\Omega \rightarrow \frac{\Omega}{\delta}$$

markieren. δ ist dabei ein kleiner Parameter, der am Ende unserer Betrachtungen wieder zu 1 gesetzt werden muß, um die korrekten Werte der physikalischen Größen wiederherzustellen. Die Resultate Sivukhins in 1. Ordnung δ lauten nun

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{R}} &= v_{\parallel} \mathbf{b} + \delta \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} + \frac{1}{2} \delta \frac{v_{\perp}^2}{\Omega} \frac{\mathbf{b} \times \nabla B}{B} - \delta \frac{v_{\parallel}^2}{\Omega} \mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{b}) \\ \dot{v}_{\parallel} &= \frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} + \frac{1}{2} v_{\perp}^2 \nabla \mathbf{b} \\ \dot{v}_{\perp} &= -\frac{1}{2} v_{\parallel} v_{\perp} \nabla \mathbf{b} .\end{aligned}\tag{1.54}$$

In diesen Ausdrücken erkennt man diverse wohlbekannte Drift-Effekte (Chen 1974, Wesson 1987), wie die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift, die ∇B -Drift und die Curvature-Drift (letzter Term in der Gleichung für $\dot{\mathbf{R}}$). Die Terme proportional zu $\nabla \mathbf{b}$ in den Beschleunigungen $\dot{v}_{\parallel}$ und $\dot{v}_{\perp}$ beschreiben den Spiegeleffekt.

Der Liouville-Term wird in diesen Variablen

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{R}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}} + \dot{v}_{\parallel} \frac{\partial f}{\partial v_{\parallel}} + \dot{v}_{\perp} \frac{\partial f}{\partial v_{\perp}} .\tag{1.55}$$

Man erkennt, daß dieser Ausdruck für df/dt nicht von der allgemeinen Fokker-Planck-Form ist (siehe Kapitel 2, Gleichung (2.13)), d. h.

$$\dot{\mathbf{R}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}} + \dot{v}_{\parallel} \frac{\partial f}{\partial v_{\parallel}} + \dot{v}_{\perp} \frac{\partial f}{\partial v_{\perp}} \neq \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} f) + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (\dot{v}_{\parallel} f) + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (\dot{v}_{\perp} f) .\tag{1.56}$$

Wie bereits erwähnt, ist aber eine driftkinetische Gleichung in Fokker-Planck-Form wesentliche Voraussetzung für die Anwendbarkeit unserer numerischen (Monte-Carlo-) Methode. Diese Form kann aber in gewissen Grenzen wiederhergestellt werden, wenn man beachtet, daß ein Faktor $1/v_{\perp}$ (Jacobi-Determinante der Transformation) auf der rechten Seite der transformierten Gleichung auftaucht, die den Coulomb-Term (1.50) enthält (siehe die Transformationsgleichung (1.25)). Dieser Faktor würde auch die Fokker-Planck-Struktur der transformierten rechten Seite zerstören, doch liefert eine Multiplikation unserer vollständigen driftkinetischen Gleichung mit $v_{\perp}$ einen Coulomb-Stoßterm in Fokker-Planck-Form für die rechte Seite und für die linke Seite

$$\begin{aligned}
v_{\perp} \dot{\mathbf{R}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}} + v_{\perp} \dot{v}_{\parallel} \frac{\partial f}{\partial v_{\parallel}} + v_{\perp} \dot{v}_{\perp} \frac{\partial f}{\partial v_{\perp}} &= \\
= \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (v_{\perp} \dot{\mathbf{R}} f) + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (v_{\perp} \dot{v}_{\parallel} f) + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (v_{\perp} \dot{v}_{\perp} f) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} - v_{\parallel} \mathbf{b}) v_{\perp} f \\
= \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (\dot{v}_{\parallel} \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (\dot{v}_{\perp} \bar{f}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} - v_{\parallel} \mathbf{b}) \bar{f} \\
= \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (\dot{v}_{\parallel} \bar{f}) + \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (\dot{v}_{\perp} \bar{f}) - O(\delta)
\end{aligned} \tag{1.57}$$

wobei

$$\bar{f}(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t) = v_{\perp} f(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp}, t) \tag{1.58}$$

ist (siehe auch Gleichung (1.51) für die Transformation der Verteilungsfunktion). In der obigen Gleichung (1.57) erscheint neben den Drift- und Diffusionstermen in Fokker-Planck-Form außerdem ein Quellen- bzw. Senkenterm der Ordnung $O(\delta)$, welcher in unseren Anwendungen vernachlässigt werden soll. Diese Näherung mag zunächst ungerechtfertigt erscheinen, da dieser Term von derselben Ordnung im kleinen Parameter δ ist wie die Driften in der Guiding-Center-Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{R}}$. Diese etwas grobe Vorgehensweise zur Wiederherstellung der Form einer Erhaltungsgleichung weist auf bekannte inhärente Probleme bei der driftkinetischen Approximation hin (Balescu 1988, Kapitel 1). Durch die spezielle Mittelungsprozedur zur Eliminierung der Gyrationwinkelabhängigkeit in der linken Seite der kinetischen Gleichung (1.14) geht die sogenannte Hamilton-Struktur (Möglichkeit einer Fokker-Planck-Form) verloren und artifizielle Quellterme treten in Erscheinung, obgleich sie in der ursprünglichen Gleichung nicht enthalten waren. Diese Mittelung entspricht nicht einer Punkttransformation, wie wir sie für den Coulomb-Term benutzten, bei der einem Punkt in den alten Koordinaten ein Punkt in den neuen zugeordnet wird. Hierbei wird vielmehr ein Punkt in den neuen Koordinaten einem Integral über einen Pfad im ursprünglichen Phasenraum zugeordnet. Balescu gab Methoden für die driftkinetische Approximation an, die die Hamilton-Struktur der kinetischen Gleichung bis zur Ordnung $O(\delta)$ wiederherstellen, indem sogenannte „natürliche Guiding-Center-Variablen“ eingeführt werden, die pseudo-kanonischen Transformationen entsprechen. Methoden zur Herleitung driftkinetischer Gleichungen in Fokker-Planck-Form in beliebiger Ordnung in δ wurden von Gardner und Weitzner entwickelt (Gardner 1959, Weitzner 1981). Leider lassen die Variablensätze dieser verfeinerten Formalismen nicht die einfache physikalische Interpretation zu wie die von uns benutzten Variablen $\mathbf{R}$,

$v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$. Auch ist eine Rücktransformation auf $\mathbf{R}$, $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$ nicht bekannt. Dies verhindert ihre Anwendung in unserer numerischen Methode, die darauf abzielt, Momente der Geschwindigkeitsvariablen $v_{\parallel}$ und $v_{\perp}$ zu berechnen. Aufgrund der angesprochenen Probleme entschlossen wir uns zur nachträglichen Korrektur der driftkinetischen Gleichung durch Vernachlässigung der unphysikalischen Quellterme (obgleich der Liouville-Term keine inelastischen Prozesse beschreibt, ist die Teilchenerhaltung im Phasenraum $(\mathbf{R}, v_{\parallel}, v_{\perp})$ nicht gewährleistet!). Eine ausführlichere Analyse dieser Terme ist in Anhang F gegeben. Dort wird auch gezeigt, daß diese Terme in unseren Anwendungen von durchaus vernachlässigbarer Größenordnung sein können im Vergleich mit Quellen bzw. Senken wie sie infolge von Ionisationsprozessen auftreten.

1.4 Erweiterung des Transportmodells für Anwendungen in Tokamak-Plasmen

Faßt man die Resultate der letzten Abschnitte zusammen, so erhält man die folgende driftkinetische Gleichung für den Testteilchentransport

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} \bar{f}) - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (\dot{v}_{\parallel} \bar{f}) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (\dot{v}_{\perp} \bar{f}) \\
& - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (K_{\parallel} \bar{f}) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (K_{\perp} \bar{f}) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} (D_{\parallel\parallel} \bar{f}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} (D_{\parallel\perp} \bar{f}) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} (D_{\perp\parallel} \bar{f}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} (D_{\perp\perp} \bar{f}) \quad .
\end{aligned} \tag{1.59}$$

Die Zeitableitungen $\dot{\mathbf{R}}$, $\dot{v}_{\parallel}$ und $\dot{v}_{\perp}$ wurden in Gleichung (1.54) definiert, die Koeffizienten $K_{\parallel}$, $K_{\perp}$, $D_{\parallel\parallel}$, ... in den Gleichungen (1.52). Sie beschreiben das Verhalten geladener Teilchen unter der Wirkung stationärer elektrischer und magnetischer Felder und der Coulomb-Wechselwirkung mit einem Fluid-Hintergrundplasma. Für eine realistische Beschreibung der Verunreinigungen in Tokamak-Plasmen ist es aber notwendig, weitere physikalische Prozesse zu berücksichtigen, die das Transportverhalten entscheidend mitbestimmen:

- (i) Anomaler Transport: Als anomalen Transport bezeichnet man einen experimentell beobachteten verstärkten Transport geladener Teilchen in Richtung senkrecht zum Magnetfeld, der von klassischen und neoklassischen Theorien nicht beschrieben wird (Bohm 1949, Chen 1974). In der klassischen

Theorie (die für den Transport in einem Zylinder maßgeblich ist) wird die Coulomb-Streuung der Teilchen aneinander als Ursache für einen radialen (diffusiven) Transport betrachtet. In der neoklassischen Theorie wird außerdem die Auswirkung der toroidalen Geometrie realer Tokamak-Plasmen berücksichtigt. Die Möglichkeit von gefangenen Teilchen (Teilchen pendeln zwischen magnetischen Spiegeln) und zusätzlichen Driften im inhomogenen Torusfeld führt auf einen gegenüber dem klassischen Resultat erhöhten radialen Transport, wobei üblicherweise verschiedene Regimes unterschieden werden, die unterschiedlicher Stößigkeit entsprechen (Bananen-Regime, Plateau-Regime und Pfirsch-Schlüter-Regime in der Reihenfolge zunehmender Stößigkeit). Offensichtlich existieren aber, wie gesagt, noch weitere Mechanismen in realen Plasmen, die einen zusätzlichen Transport verursachen. Der Ursprung dieses verstärkten Transports ist noch nicht vollständig geklärt, und seine theoretische Beschreibung ist verwickelt und Gegenstand gegenwärtiger Untersuchungen (eine etablierte Auffassung ist, daß turbulente elektrische und magnetische Felder den anomalen Transport verursachen (Fußmann 1992)). Wir berücksichtigen den anomalen Transport durch einen zusätzlichen diffusiven Transport im Ortsraum und führen in obige Gleichung (1.59) einen Term der Form

$$\sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_k} (\hat{r}_i \hat{r}_k D_{\perp} \bar{f}) \quad (1.60)$$

ein. $\hat{r}$ bezeichnet darin den Einheitsvektor in radialer Richtung. $D_{\perp}$ ist der anomale Diffusionskoeffizient, der als freier Modellparameter dient. Er kann als geeignet gewählte Konstante der Größenordnung $\sim 1 \text{ m}^2/\text{s}$ angesetzt oder als Funktion des Ortes gewählt werden (zum Beispiel entsprechend des Alcator-Scalings (Gondhalekar et al. 1979): $D_{\perp} = 5 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-1}\text{s}^{-1}/n_e$ mit $n_e \equiv$ Elektronendichte in m^{-3}). Dieser so eingeführte anomale Transport soll überdies in gewissen Grenzen den klassischen und neoklassischen Transport senkrecht zum Magnetfeld in unserem Modell wiederherstellen, der durch unsere driftkinetische Näherung teilweise verloren ging (siehe hierzu die speziellen Voraussetzungen in Abschnitt 1.3.2 zur Berechnung der Koeffizienten des Coulomb-Stoßterms).

- (ii) Ionisations- und Rekombinationsprozesse: Diese Prozesse werden in unserem Formalismus durch Quellen und Senken der Art $S_I^Z \bar{f}^Z$ bzw. $S_R^Z \bar{f}^Z$ berücksichtigt. S_I^Z und S_R^Z sind Übergangswahrscheinlichkeiten pro Zeiteinheit für die Ionisation bzw. Rekombination eines Teilchens der Ladung Z . Derartige Ladungsänderungsprozesse führen auf ein gekoppeltes System driftkinetischer Gleichung der Form (1.59) für die Verteilungsfunktion der unterschiedlichen Ladungszustände der Verunreinigungen.

- (iii) Andere Teilchenquellen und -senken: Die Effekte von Absorption und/oder physikalischer Zerstäubung aufgrund von Stößen der Verunreinigungen mit Tokamak-Wänden sowie Prozesse wie Verunreinigungsinjektion etc. sollen hier summarisch durch die Quell-Terme Q_Z^+ und Q_Z^- erfaßt werden.

Konkrete Ausdrücke für die Terme $S_I^Z \bar{f}^Z$, $S_R^Z \bar{f}^Z$, Q_Z^+ und Q_Z^- werden im Kapitel 3 im Zusammenhang mit unseren praktischen Anwendungen angegeben und erläutert.

Letztendlich bildet das folgende Gleichungssystem die Basis für unsere numerischen Anwendungen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}^Z}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} \bar{f}^Z) - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (v_{\parallel} \bar{f}^Z) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (v_{\perp} \bar{f}^Z) \\
& -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (K_{\parallel} \bar{f}^Z) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (K_{\perp} \bar{f}^Z) \\
& +\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} (D_{\parallel\parallel} \bar{f}^Z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} (D_{\parallel\perp} \bar{f}^Z) \\
& +\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} (D_{\perp\parallel} \bar{f}^Z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} (D_{\perp\perp} \bar{f}^Z) \\
& + \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_k} (\hat{r}_i \hat{r}_k D_{\perp} \bar{f}^Z) \\
& -S_I^Z \bar{f}^Z + S_I^{Z-1} \bar{f}^{Z-1} - S_R^Z \bar{f}^Z + S_R^{Z+1} \bar{f}^{Z+1} \\
& +Q_Z^+ - Q_Z^- \quad .
\end{aligned} \tag{1.61}$$

1.5 Anmerkungen zum Modell-Coulomb-Term

1.5.1 Die Thermokraft

Als Thermokräfte werden gemeinhin Kraftterme in den fluidtheoretischen Impulsgleichungen bezeichnet, die proportional zu den Temperaturgradienten der wechselwirkenden Partikel sind. Ein Ausdruck für die Thermokraft, die eine zeitliche Änderung des mittleren Impulses $\langle v_{\parallel} \rangle$ der Verunreinigungen parallel zu den Magnetfeldlinien bewirkt, wurde von Neuhauser et al. angegeben (Neuhauser et al. 1984)

$$m \frac{\partial \langle v_{\parallel} \rangle}{\partial t} \equiv m \int v_{\parallel} \frac{\partial f(\mathbf{v}, t)}{\partial t} d\mathbf{v} = \beta_Z \nabla_{\parallel} T_b \quad . \tag{1.62}$$

Darin ist T_b die Temperatur der Hintergrundionenspezies, mit der die Verunreinigungen der Ladung Z wechselwirken. Der Koeffizient der Thermokraft lautet

$$\beta_Z = -3 \frac{1 - \mu - 5 \sqrt{2} Z^2 (1.1 \mu^{5/2} - 0.35 \mu^{3/2})}{2.6 - 2 \mu + 5.4 \mu^2} , \quad (1.63)$$

worin $\mu = m/(m + m_b)$ ist. Dieser Koeffizient ergibt sich für den Sonderfall, daß die Verunreinigungen in nur geringer Konzentration im Deuterium-Elektronen-Plasma vorhanden sind (Testfluidmodell), aus allgemeineren Ausdrücken, die von Chapman und Cowling für ein mehrkomponentiges Plasma in der Fluidnäherung abgeleitet wurden (Chapman und Cowling 1960, Kapitel 9). Wie in Abschnitt 1.3.2 erläutert, berücksichtigen wir in unserem Testteilchenmodell die Inhomogenitäten in der Hintergrundtemperatur durch Zusatzterme in den Trubnikov-Potentialen (1.44), was zu entsprechenden Erweiterungen in den Drift- und Diffusionskoeffizienten (1.52) führte. Daß überhaupt in unserem Modell explizit die makroskopische Größe Hintergrundtemperatur auftaucht, liegt an unserem Hybrid-Konzept, in dem das Hintergrundplasma in der Fluidnäherung und die Verunreinigungen in einem kinetischem Modell betrachtet werden. Der obige Kraftterm (1.62) aber basiert auf einem Fluidmodell, in dem auch für die Verteilungsfunktion der Verunreinigungen eine Maxwell-Verteilung mit kleiner Störung angesetzt wird. Trotzdem wurde die Thermokraft (1.62) oftmals in Monte-Carlo-Algorithmen für den Verunreinigungstransport verwendet, die auf demselben Hybrid-Konzept fußen wie der unsrige (Stangeby 1992, Takizuka und Shimizu 1994, Kögler 1997). In diesen Rechnungen wird die obige Thermokraft durch eine Einteilchen-Driftbewegung

$$\frac{\partial v_{\parallel}}{\partial t} \approx \frac{\partial \langle v_{\parallel} \rangle}{\partial t} = \frac{\beta_Z}{m} \nabla_{\parallel} T_b \quad (1.64)$$

entlang der Magnetfeldlinien berücksichtigt. Dies stellt aber nach eben gesagtem eine Inkonsistenz dar, denn bei dieser Vorgehensweise wird für die Kraft, die auf ein einzelnes Verunreinigungsteilchen wirkt, die mittlere Kraft, die auf ein annähernd maxwellsches Ensemble wirkt, angesetzt. Es wird also implizit eine Annahme über die zu berechnende Verteilungsfunktion der Verunreinigungen gemacht. Insbesondere ist die Thermokraft in der kinetischen Betrachtung ein Effekt, der stark von der Relativgeschwindigkeit der Wechselwirkungspartner abhängt (Rutherford'sche Streuformel für die Coulomb-Wechselwirkung). So führt der Temperaturgradient $\nabla_{\parallel} T_b$ in unserem Modell zu einer Einteilchen-Driftbewegung der Form

$$\frac{\partial v_{\parallel}}{\partial t} = \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \alpha \Lambda C_1 \left(\frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \phi_1'(\chi) + \frac{\chi_{\perp}^2}{\chi^2} \frac{\phi_1(\chi)}{\chi} \right) . \quad (1.65)$$

Die rechte Seite ist dabei der zu $\nabla_{\parallel} T_b$ proportionale Anteil des Driftkoeffizienten $K_{\parallel}$ aus Gleichung (1.52), wobei

$$\Lambda = \lambda \frac{Z^2 Z_b^2 e^4}{4\pi\epsilon_0^2 m^2} n_b \quad ; \quad \alpha = \sqrt{\frac{m_b}{2T_b}} \quad ; \quad C_1 = \frac{3}{8\sqrt{\pi}} \frac{16\pi^2 \epsilon_0^2 T_b}{Z_b^4 \lambda e^4} \frac{T_b}{n_b} \tilde{\kappa}_{\parallel} \nabla_{\parallel} T_b \quad . \quad (1.66)$$

Dies kann auch in einer zu (1.64) analogen Form geschrieben werden

$$\frac{\partial v_{\parallel}}{\partial t} = \frac{\tilde{\beta}_Z(\chi)}{m} \nabla_{\parallel} T_b \quad , \quad (1.67)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{\beta}_Z(\chi) &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) m \alpha \Lambda \frac{C_1}{\nabla_{\parallel} T_b} \left(\frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \phi_1'(\chi) + \frac{\chi_{\perp}^2}{\chi^2} \frac{\phi_1(\chi)}{\chi} \right) \\ &= \left(1 + \frac{m_b}{m}\right) \frac{3}{2} \frac{Z^2}{Z_b^2} \tilde{\kappa}_{\parallel} (1 - 2\chi_{\parallel}^2) e^{-\chi^2} \quad . \end{aligned} \quad (1.68)$$

Man erkennt, daß der Koeffizient $\tilde{\beta}_Z$ sowohl vom Betrag wie auch von der Richtung der Relativgeschwindigkeit χ abhängt. In Abbildung 1.1 zeigen wir einen Vergleich des fluidtheoretischen Koeffizienten β_Z mit dem geschwindigkeitsabhängigen Koeffizienten $\tilde{\beta}_Z(\chi)$ unseres kinetischen Modells für das Massenverhältnis $m/m_b = 10$ der Verunreinigungs- und der Hintergrundionen sowie verschiedene Ladungszahlen Z der Verunreinigungen (Z_b ist gleich 1). Die durchgezogenen Linien stellen die beiden Grenzfälle von $\tilde{\beta}_Z(\chi)$ dar ($\chi_{\parallel} = \chi$ und $\chi_{\parallel} = 0$, Relativgeschwindigkeit parallel bzw. senkrecht zum magnetischen Feld), die gestrichelten Linien den Koeffizienten β_Z . Für alle Ladungszahlen ergibt sich dasselbe Bild, daß der geschwindigkeitsunabhängige Koeffizient β_Z bereits für Werte der normierten Relativgeschwindigkeit χ um 1 völlig falsch ist, da sich das Vorzeichen nicht ändert. Dies entspricht aber einer für Tokamak-Plasmen recht üblichen Situation, in der die Relativgeschwindigkeit in der Größenordnung der thermischen Geschwindigkeit der Hintergrundionen liegt. Auch auf hochenergetische Verunreinigungen wirkt bei Verwendung der Thermokraft aus der Fluidnäherung eine Beschleunigung, obgleich der korrekte kinetische Ansatz das Verschwinden der Thermokraft liefert. Insgesamt führt die Näherung (1.64) für den Teilchentransport im kinetischen Modell zu einer starken Überschätzung der auf die Verunreinigungen in Richtung des Temperaturgradienten wirkenden Thermokraft.

Zur weiteren Verdeutlichung der Zusammenhänge zwischen dem fluidtheoretischen Thermokraftkoeffizienten und der Einteilchenkräfte im kinetischen Modell zeigen wir nun, wie sich der Koeffizient β_Z näherungsweise aus unserem driftkinetischen Modell-Coulomb-Term ableiten läßt. Die Driftterme des Coulomb-Terms führen zu folgender Kraft (parallel $\mathbf{B}$), die von der gestörten Hintergrundionenverteilung auf ein einzelnes Verunreinigungsteilchen ausgeübt wird

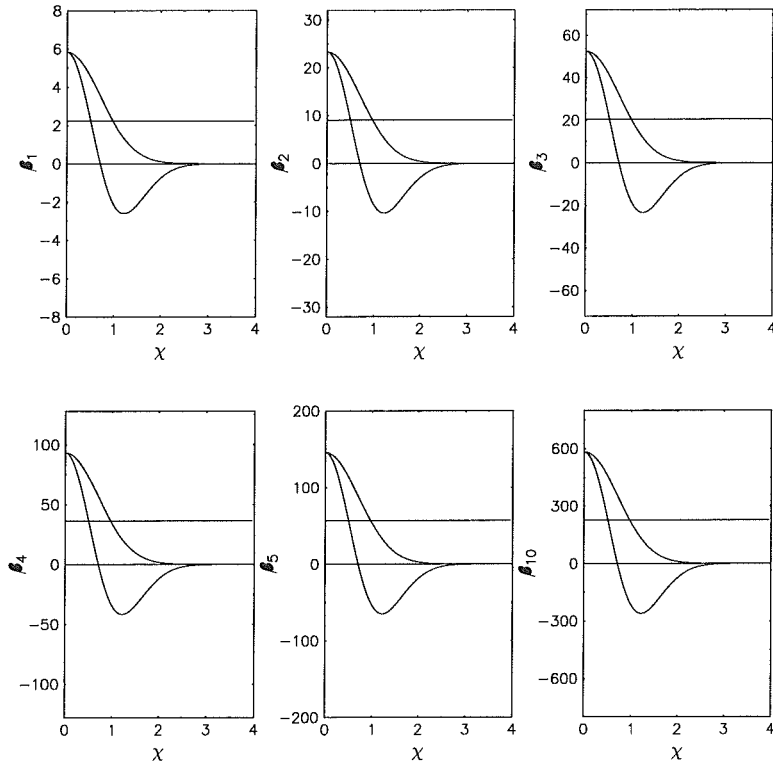


Abbildung 1.1: Vergleich der Koeffizienten β_Z und $\tilde{\beta}_Z(\chi)$ der Thermokraft im Fluidmodell (gestrichelte Linien) bzw. im kinetischen Modell (durchgezogene Linien) für die Ladungszahlen $Z = 1, 2, 3, 4, 5, 10$. Z_b ist gleich 1. Gezeigt werden für $\tilde{\beta}_Z(\chi)$ die Grenzfälle $\chi_{\parallel} = \chi$ (untere durchgezogene Linien) und $\chi_{\parallel} = 0$ (obere durchgezogene Linien).

$$m \frac{\partial v_{\parallel}}{\partial t} = m K_{\parallel} = m \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \frac{\partial \phi}{\partial v_{\parallel}} \quad . \quad (1.69)$$

Für unsere Betrachtungen beschränken wir uns hier auf den Anteil, der durch die ungestörte Hintergrund-Maxwell-Verteilung und der Störung proportional zum Gradienten $\nabla_{\parallel} T_b$ hervorgerufen wird

$$m \frac{\partial v_{\parallel}}{\partial t} = m \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha \left(\frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \phi'_0(\chi) + C_1 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \phi'_1(\chi) + C_1 \frac{\chi_1^2}{\chi^2} \frac{\phi_1(\chi)}{\chi} \right) \quad . \quad (1.70)$$

Gemäß der Definitionen von $\phi_0(\chi)$ und $\phi_1(\chi)$ folgt

$$m \frac{\partial v_{\parallel}}{\partial t} = m \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha^2 \left(\frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \left(\frac{1}{\chi} \Phi'(\chi) - \frac{1}{\chi^2} \Phi(\chi) \right) + C_1 (1 - 2 \chi_{\parallel}^2) \Phi'(\chi) \right) \quad . \quad (1.71)$$

Um die (lineare) Thermokraft auf das Ensemble der Testteilchen (Verunreinigungen) zu berechnen, müssen wir eine Annahme über deren Verteilungsfunktion f machen und das Integral

$$F = \int m \frac{\partial v_{\parallel}}{\partial t} f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \approx \hat{\beta}_Z \nabla_{\parallel} T_b \quad (1.72)$$

berechnen, wobei wir nur Terme in erster Ordnung in $\nabla_{\parallel} T_b$ berücksichtigen. Der in der letzten Gleichung definierte Koeffizient $\hat{\beta}_Z$ sollte im Idealfall mit dem Koeffizienten β_Z übereinstimmen. Für eine vollständige Übereinstimmung sollten wir aber denselben approximativen Coulomb-Stoßterm und die gleichen Ansätze für die Verteilungsfunktionen beider Ionenspezies verwenden, die Chapman und Cowling benutzten. Diese Informationen sind jedoch in ihrer Ableitung in sehr verwickelter Weise in einem umfangreichen Formalismus versteckt, wobei zudem andere als die von uns verwendeten Ansätze benutzt wurden. So wird dort der Coulomb-Stoßterm - wie in der magnetohydrodynamischen Theorie üblich - unter Ausnutzung kleiner Massenverhältnisse vereinfacht und gewisse Parameter der Verteilungsfunktionen durch Laguerre-Sonine-Polynome dargestellt (wir benutzen irreduzible tensorielle Hermite-Polynome zur Darstellung der Verteilungsfunktion selbst). Der Einfachheit halber verwenden wir hier einen plausiblen Ansatz für die Verteilungsfunktion der Verunreinigungen, der in etwa die Annahmen widerspiegelt, die in die Theorie von Chapman und Cowling eingingen.

Auch für die Verunreinigungen wird dabei eine Maxwell-Verteilung angenommen mit einer Störung infolge einer Temperaturinhomogenität. Wir nehmen an, daß die Verunreinigungen dieselbe Temperatur und Strömungsgeschwindigkeit besitzen wie die Hintergrundionen, und für Massen m größer oder gleich der Hauptionenmasse m_b soll ihre Verteilungsfunktion dieselbe Struktur besitzen wie die der Hauptionen, d. h.

$$f(\tilde{\chi}) = \frac{\tilde{\alpha}^3}{\pi^{3/2}} e^{-\tilde{\chi}^2} \left(1 - C_1 \tilde{\chi}_{\parallel} (2\tilde{\chi}^2 - 5) \right) \quad (1.73)$$

wobei

$$\hat{\alpha} = \sqrt{\frac{m}{2T_b}} \quad ; \quad \tilde{\chi} = \hat{\alpha} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_b) = \frac{\hat{\alpha}}{\alpha} \chi \quad (1.74)$$

ist.

Für den Fall, daß $m \ll m_b$ soll die Ersetzung

$$C_1 \rightarrow \frac{Z_b^2}{Z^2} C_1 \quad (1.75)$$

gelten, die näherungsweise die Modifikation erfaßt, die sich aufgrund des kleinen Massenverhältnisses ergibt. Dies entspricht der Abhängigkeit von den Ladungen der Wechselwirkungspartner, wie sie auch in der Elektronen-Verteilungsfunktion für ein zweikomponentiges Plasma auftritt (Balescu 1988). Um zwischen den beiden Grenzfällen sehr kleiner und sehr großer Massen m zu interpolieren, verwenden wir den einfachen Ansatz

$$f(\tilde{\chi}) = \frac{\tilde{\alpha}^3}{\pi^{3/2}} e^{-\tilde{\chi}^2} \left(1 - \left(\mu + (1 - \mu) \frac{Z_b^2}{Z^2} \right) C_1 \tilde{\chi}_{\parallel} (2\tilde{\chi}^2 - 5) \right) \quad (1.76)$$

mit $\mu = m/(m + m_b)$.

Die zu $\nabla_{\parallel} T_b$ proportionale Kraft F aus Gleichung (1.72) setzt sich dann zusammen aus den Anteilen F_1 , der die Kraftwirkung der ungestörten Hintergrund-Maxwell-Verteilung auf die Störung in der Verteilung der Verunreinigungen erfaßt, und F_2 , der Kraft, die von der Hintergrundstörung auf die ungestörte Verteilung der Verunreinigungen ausgeübt wird.

Für diese Anteile folgt gemäß (1.71), (1.72) und (1.76)

$$\begin{aligned}
F_1 &= -m \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \pi^{-3/2} \Lambda \alpha^2 C_1 \left(\mu + (1 - \mu) \frac{Z_b^2}{Z^2}\right) \times \\
&\quad \times \int \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \left(\frac{1}{\chi} \Phi'(\chi) - \frac{1}{\chi^2} \Phi(\chi)\right) \hat{\chi}_{\parallel} (2\hat{\chi}^2 - 5) e^{-\hat{\chi}^2} d\hat{\chi} \\
&= -\frac{3}{4\pi} \left(1 + \frac{m_b}{m}\right) \frac{Z^2}{Z_b^2} \tilde{\kappa}_{\parallel} \nabla_{\parallel} T_b \left(\mu + (1 - \mu) \frac{Z_b^2}{Z^2}\right) \times \\
&\quad \times \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{\infty} \left(\frac{\tilde{\alpha}}{\alpha} \hat{\chi}^2 \Phi' \left(\frac{\alpha}{\tilde{\alpha}} \hat{\chi}\right) - \frac{\tilde{\alpha}^2}{\alpha^2} \hat{\chi} \Phi \left(\frac{\alpha}{\tilde{\alpha}} \hat{\chi}\right)\right) \cos^2 \vartheta \times \quad (1.77) \\
&\quad \times (2\hat{\chi}^2 - 5) e^{-\hat{\chi}^2} d\hat{\chi} d\cos\vartheta d\varphi \\
&= -\left(1 + \frac{m_b}{m}\right) \frac{Z^2}{Z_b^2} \tilde{\kappa}_{\parallel} \nabla_{\parallel} T_b \left(\mu + (1 - \mu) \frac{Z_b^2}{Z^2}\right) \times \\
&\quad \times \int_0^{\infty} \left(\frac{\tilde{\alpha}}{\alpha} \hat{\chi}^2 \Phi' \left(\frac{\alpha}{\tilde{\alpha}} \hat{\chi}\right) - \frac{\tilde{\alpha}^2}{\alpha^2} \hat{\chi} \Phi \left(\frac{\alpha}{\tilde{\alpha}} \hat{\chi}\right)\right) (2\hat{\chi}^2 - 5) e^{-\hat{\chi}^2} d\hat{\chi} \\
F_2 &= m \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \pi^{-3/2} \Lambda \alpha^2 C_1 \int (1 - 2\chi_{\parallel}^2) \Phi'(\chi) e^{-\chi^2} d\chi \\
&= \frac{3}{4\pi} \left(1 + \frac{m_b}{m}\right) \frac{Z^2}{Z_b^2} \tilde{\kappa}_{\parallel} \nabla_{\parallel} T_b \times \\
&\quad \times \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{\infty} \left(1 - 2 \frac{\alpha^2}{\tilde{\alpha}^2} \hat{\chi}^2 \cos^2 \vartheta\right) \hat{\chi}^2 \Phi' \left(\frac{\alpha}{\tilde{\alpha}} \hat{\chi}\right) e^{-\hat{\chi}^2} d\hat{\chi} d\cos\vartheta d\varphi \\
&= 3 \left(1 + \frac{m_b}{m}\right) \frac{Z^2}{Z_b^2} \tilde{\kappa}_{\parallel} \nabla_{\parallel} T_b \int_0^{\infty} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{\alpha^2}{\tilde{\alpha}^2} \hat{\chi}^2\right) \hat{\chi}^2 \Phi' \left(\frac{\alpha}{\tilde{\alpha}} \hat{\chi}\right) e^{-\hat{\chi}^2} d\hat{\chi} \quad (1.78)
\end{aligned}$$

Die Terme F_1 und F_2 wurden von uns numerisch ausgewertet und der sich ergebende Koeffizient $\hat{\beta}_Z$ mit dem Koeffizienten β_Z verglichen. Abbildung 1.2 zeigt die Thermokraftkoeffizienten β_Z (nach Neuhauser et al., Gleichung (1.63)) und $\hat{\beta}_Z$ (Ergebnis unserer Ableitung durch Integration kinetischer Größen) in Abhängigkeit des Massenverhältnisses $\mu = m/(m+m_b)$. Für $m \geq m_b$ ($\mu \geq 0.5$) ist die Übereinstimmung sehr gut, insbesondere für $Z = 1$. Für den Fall $m < m_b$ ($\mu < 0.5$) ist

die Übereinstimmung erst bei höheren Ladungszahlen befriedigend. Trotz gewisser Abweichungen der auf verschiedenen Wegen abgeleiteten Thermokraftkoeffizienten, zeigt der Vergleich, daß unser Modell-Coulomb-Term beim Übergang zu einer Betrachtung der Verunreinigungen im Testfluidmodell im wesentlichen gleiche Resultate liefert. Eine bessere Übereinstimmung wäre zu erwarten, würde man unseren ad-hoc-Ansatz für die Verteilungsfunktion der Verunreinigungen durch eine strengere Betrachtung ersetzen. Doch liefert bereits diese einfache Näherung eine erfreuliche Bestätigung für die Richtigkeit unseres Modells, indem sie den Brückenschlag zwischen verschiedenen theoretischen Ansätzen demonstriert.

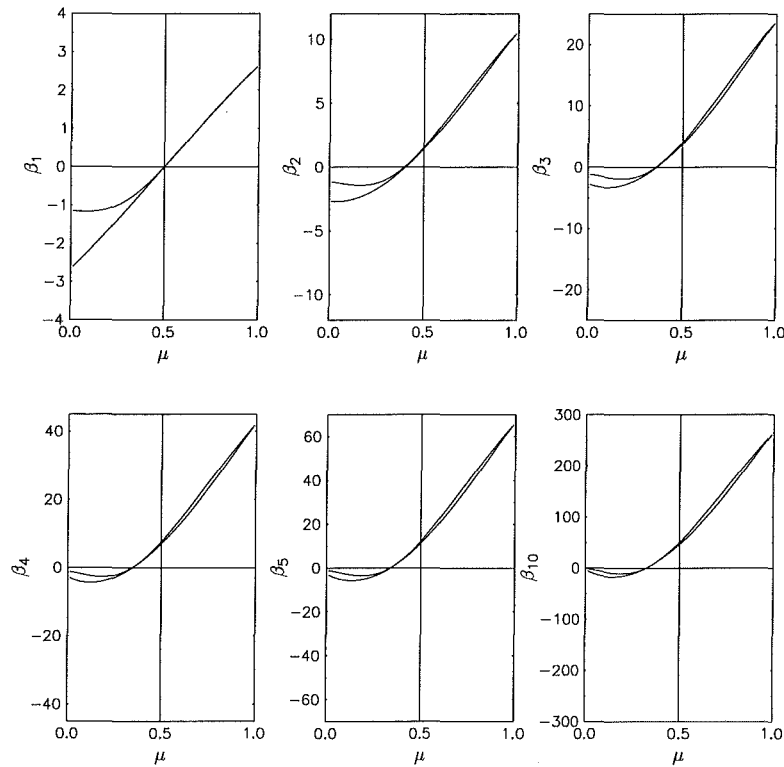


Abbildung 1.2: Vergleich der fluidtheoretischen Thermokraftkoeffizienten $\beta_Z(\mu)$ und $\hat{\beta}_Z(\mu)$ nach Neuhauser et al. (durchgezogene Linien) bzw. nach unserem Modell (gestrichelte Linien) in Abhängigkeit von $\mu = m/(m + m_b)$ und für die Ladungszahlen $Z = 1, 2, 3, 4, 5, 10$. Z_b ist hier gleich 1.

1.5.2 Limits für die räumlichen Inhomogenitäten der Hintergrundverteilung

Die Wahl von Maxwell-Verteilungen mit kleiner Störung (Gleichung (1.15) für die Verteilungsfunktionen der Plasmateilchen erlaubt die Integration der kinetischen Gleichungen und den Übergang zur fluidtheoretischen Beschreibung des

Plasmas. Dabei wird an die Störung, die als proportional zu den räumlichen Inhomogenitäten makroskopischer Größen wie Temperatur, mittlere Strömungsgeschwindigkeit etc. angenommen wird, die Forderung gestellt, daß sie betragsmäßig viel kleiner als 1 ist. Dies ist gleichbedeutend damit, daß die charakteristischen Längen, auf denen sich die makroskopischen Parameter ändern, viel größer sind als die mittlere freie Weglänge für die Coulomb-Wechselwirkung der Plasmateilchen, und somit die Voraussetzung eines lokalen Gleichgewichts erfüllt ist. Die Frage jedoch, ob eine zwar kleine Störung nicht bereits aus dem Gültigkeitsbereich des Fluidmodells herausführt, wird dabei meistens nicht beantwortet.

In diesem Abschnitt werden wir zeigen, wie sich aus unserem Modell-Coulomb-Term (1.50), der die Coulomb-Kraftwirkung von Hintergrundionen, die einer Verteilung der Form (1.28) gehorchen, auf Testteilchen beschreibt, quantitative Limits für die von uns berücksichtigte Störung (1.29) der Hintergrundverteilungsfunktion ableiten lassen. Sie ergeben sich aus der Notwendigkeit eines positiv semidefiniten Diffusionstensors. Ein Diffusionstensor, der diese Forderung nicht erfüllt, ließe die unphysikalische Situation auftreten, daß die Verteilungsfunktion negativ würde, also eine negative Wahrscheinlichkeit aufträte. Um dies zu begründen gehen wir von der folgenden driftkinetischen Gleichung aus

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{f}^Z(\mathbf{v})}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (K_{\parallel} \bar{f}^Z(\mathbf{v})) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (K_{\perp} \bar{f}^Z(\mathbf{v})) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} (D_{\parallel\parallel} \bar{f}^Z(\mathbf{v})) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} (D_{\parallel\perp} \bar{f}^Z(\mathbf{v})) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} (D_{\perp\parallel} \bar{f}^Z(\mathbf{v})) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} (D_{\perp\perp} \bar{f}^Z(\mathbf{v})) \quad , \end{aligned} \quad (1.79)$$

die als Sonderfall der Gleichung (1.61) den Transport von Testteilchen der Ladung Z unter alleiniger Wirkung der Coulomb-Wechselwirkung mit den Hintergrundionen beschreibt. Wir stellen uns nun eine Situation vor, in der die Verteilungsfunktion $\bar{f}^Z(\mathbf{v})$ an einem Punkt $\mathbf{v} = \mathbf{v}_0$ gleich Null ist (lokales Minimum). Dann gilt für kleine $|\mathbf{v} - \mathbf{v}_0|$, daß

$$\bar{f}^Z(\mathbf{v}) \approx \frac{1}{2} \sum_{i,k} \left. \frac{\partial^2 \bar{f}^Z(\mathbf{v})}{\partial v_i \partial v_k} \right|_{\mathbf{v}=\mathbf{v}_0} (v_i - v_{0i}) (v_k - v_{0k}) > 0 \quad (1.80)$$

und der Tensor $\partial^2 \bar{f}^Z(\mathbf{v}) / \partial v_i \partial v_k \big|_{\mathbf{v}=\mathbf{v}_0}$ somit positiv definit ist (die Indizes i und k stehen hier für $\parallel$ bzw. $\perp$). Betrachtet man die driftkinetische Gleichung (1.79) an der Stelle $\mathbf{v} = \mathbf{v}_0$, so erhält man

$$\left. \frac{\partial \bar{f}^Z(\mathbf{v})}{\partial t} \right|_{\mathbf{v}=\mathbf{v}_0} = \frac{1}{2} \sum_{i,k} D_{ik} \left. \frac{\partial^2 \bar{f}^Z(\mathbf{v})}{\partial v_i \partial v_k} \right|_{\mathbf{v}=\mathbf{v}_0} . \quad (1.81)$$

Damit $\partial \bar{f}^Z(\mathbf{v})/\partial t|_{\mathbf{v}=\mathbf{v}_0} \geq 0$ ist, muß der Diffusionstensor D_{ik} positiv semidefinit sein. Wäre er es nicht, so ist der Fall $\partial \bar{f}^Z(\mathbf{v})/\partial t|_{\mathbf{v}=\mathbf{v}_0} < 0$ möglich, was bedeutete, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte $\bar{f}^Z(\mathbf{v})$ am Ort $\mathbf{v} - \mathbf{v}_0$ negativ werden würde. Daß der Diffusionstensor positiv semidefinit sein muß, ist gleichbedeutend mit der Forderung, daß seine Determinante für alle $\mathbf{v}$ größer oder gleich Null ist. Mit diesem Kriterium werden nun die Störanteile $\mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$ des Diffusionstensors (siehe Gleichungen (B.5) und (B.6)) untersucht. Zunächst wird die Determinante

$$\det[\mathcal{C}_0 + C_1 \mathcal{C}_1] = a_1 + b_1 C_1 + c_1 C_1^2 \quad (1.82)$$

betrachtet. Die Koeffizienten a_1 , b_1 und c_1 sind

$$\begin{aligned} a_1 &= \psi_0''(\chi) \frac{\psi_0'(\chi)}{\chi} \\ b_1 &= \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \left(\psi_1''(\chi) \frac{\psi_0'(\chi)}{\chi} + \psi_0''(\chi) \left(\frac{\psi_1'(\chi)}{\chi} - \frac{\psi_1(\chi)}{\chi^2} \right) \right) \\ c_1 &= \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \psi_1''(\chi) \left(\frac{\psi_1'(\chi)}{\chi} - \frac{\psi_1(\chi)}{\chi^2} \right) - \frac{\chi_{\perp}^2}{\chi^2} \left(\frac{\psi_1'(\chi)}{\chi} - \frac{\psi_1(\chi)}{\chi^2} \right)^2 . \end{aligned} \quad (1.83)$$

Der Ausdruck (1.82) stellt (bis auf einen numerischen Vorfaktor) die Determinante des Diffusionstensors dar, falls nur die Temperaturinhomogenität des Hintergrundplasmas berücksichtigt wird ($C_1 \sim \nabla_{\parallel} T_b$). Die Ungleichung $a_1 + b_1 C_1 + c_1 C_1^2 \geq 0$ wurde von uns numerisch ausgewertet, um die Wertebereiche des Koeffizienten C_1 zu ermitteln, in denen der Diffusionstensor positiv semidefinit ist. Dies liefert auch Ober- bzw. Untergrenzen für die Gradientenlänge $T_b/\nabla_{\parallel} T_b$.

$$\frac{T_b}{\nabla_{\parallel} T_b} = \frac{6}{\sqrt{\pi}} \frac{\pi^2 \varepsilon_0^2}{e^4} \frac{\tilde{\kappa}_{\parallel} T_b^2}{\lambda Z_b^4 n_b} \frac{1}{C_1} . \quad (1.84)$$

In Abbildung 1.3 sind die Obergrenzen (gestrichelte Linien) und Untergrenzen (durchgezogene Linien) des Kehrwertes $1/C_1$ in Abhängigkeit der normierten Relativgeschwindigkeit χ für zehn verschiedene Richtungen von χ ($\chi_{\parallel}/\chi = \cos\vartheta$, $\cos\vartheta = 0, \pi/9, 2\pi/9, \dots, \pi$) zu sehen. Die Kurvenschar überdeckt den Bereich, in dem der Diffusionstensor des Coulomb-Terms nicht positiv definit und somit, nach unserem Kriterium, die Fluidnäherung für die Hintergrundteilchen nicht gültig ist.

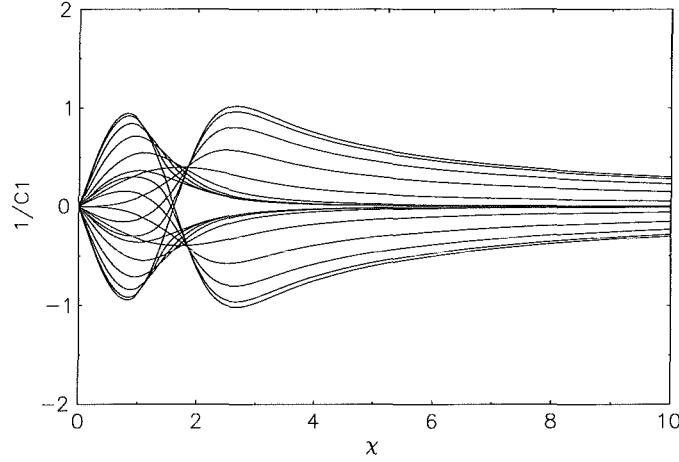


Abbildung 1.3: Untergrenzen (durchgezogene Linien) und Obergrenzen (gestrichelte Linien) für den Kehrwert $1/C_1$ für verschiedene Richtungen von χ ($\chi_{\parallel}/\chi = 0, \pi/9, 2\pi/9, \dots, \pi$). Im Bereich zwischen den Einhüllenden dieser Kurven ist der 13-Momente-Fluidansatz für die Hintergrundverteilung nicht gültig.

Die Abbildung 1.3 zeigt auch, daß der Fluid-Ansatz für die Hintergrundteilchen nur gültig ist, falls die Gradientenlänge $L_{T_b} = T_b/|\nabla_{\parallel} T_b|$ folgende Bedingung erfüllt

$$L_{T_b} = \frac{T_b}{|\nabla_{\parallel} T_b|} \geq L_{T_b}^{min} \approx 4.0 \cdot 10^{54} \frac{\tilde{\kappa}_{\parallel} T_b^2}{\lambda Z_b^4 n_b} \quad , \quad (1.85)$$

da nur dann der Diffusionstensor für alle Werte von χ positiv definit ist². (Beispiel: $\tilde{\kappa}_{\parallel} = 1.0/0.5657$, $\lambda = 13.5$, $Z_b = 1$, $T_b = 1.6022 \cdot 10^{-17} \text{ J} (= 100.0 \text{ eV})$, $n_b = 1 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3} \rightarrow L_{T_b} \geq 134 \text{ m}$).

²Es ist anzumerken, daß diese Aussage auch über unser Testteilchenmodell hinaus Gültigkeit besitzt, da der von uns betrachtete Coulomb-Term (im Rahmen unserer Näherungen) in unveränderter Form auch in einem Modell für das Gesamtplasma aufträte.

Eine analoge Betrachtung wird nun für die Determinante

$$\det[\mathbf{C}_0 + C_2 \mathbf{C}_2] = a_2 + b_2 C_2 + c_2 C_2^2 \quad (1.86)$$

mit

$$\begin{aligned} a_2 &= \psi_0''(\chi) \frac{\psi_0'(\chi)}{\chi} \\ b_2 &= \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \psi_0''(\chi) \frac{\psi_2'(\chi)}{\chi} - 6 \left(1 - 2 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \psi_0''(\chi) \frac{\psi_2(\chi)}{\chi^2} \\ &\quad + \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \psi_2''(\chi) \frac{\psi_0'(\chi)}{\chi} \\ c_2 &= \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right)^2 \psi_2''(\chi) \frac{\psi_2'(\chi)}{\chi} - 6 \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \left(1 - 2 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \psi_2''(\chi) \frac{\psi_2(\chi)}{\chi^2} \\ &\quad - 36 \frac{\chi_{\parallel}^2 \chi_{\perp}^2}{\chi^4} \left(\frac{\psi_2'(\chi)}{\chi} - \frac{\psi_2(\chi)}{\chi^2}\right)^2 \end{aligned} \quad (1.87)$$

durchgeführt.

Dies ist die Determinante des Diffusionstensors für den Fall, daß nur die Inhomogenität in der Strömungsgeschwindigkeit $\mathbf{v}_b$ der Hintergrundteilchen berücksichtigt wird. Wieder definieren wir eine charakteristische Länge durch

$$\frac{v_{th}}{3 \nabla_{\parallel} v_{b\parallel} - \nabla \mathbf{v}_b} = \frac{3}{\sqrt{\pi}} \frac{\pi^2 \varepsilon_0^2}{e^4} \frac{\tilde{\eta}_{\parallel} T_b^2}{\lambda Z_b^4 n_b} \frac{1}{C_2} \quad (1.88)$$

($v_{th} = \sqrt{2T_b/m_b}$ ist die thermische Geschwindigkeit der Hintergrundteilchen.) und bestimmten den Wertebereich von C_2 , in dem der Fluid-Ansatz für die Hintergrundteilchen möglich ist.

Die Abbildung 1.4 zeigt die Unter- und Obergrenzen des Kehrwertes $1/C_2$ für zehn verschiedene Richtungen von χ ($\chi_{\parallel}/\chi = \cos\vartheta$, $\cos\vartheta = 0, \pi/9, 2\pi/9, \dots, \pi$). Die Kurvenschar überdeckt den Bereich, in dem der Diffusionstensor des Coulomb-Terms nicht positiv definit ist.

Auch dabei läßt sich wieder eine Minimalbedingung formulieren

$$L_{v_b} = \frac{v_{th}}{|3 \nabla_{\parallel} v_{b\parallel} - \nabla \mathbf{v}_b|} \geq L_{v_b}^{min} \approx 2.7 \cdot 10^{54} \frac{\tilde{\eta}_{\parallel} T_b^2}{\lambda Z_b^4 n_b} \quad (1.89)$$

(Beispiel: $\tilde{\eta}_{\parallel} = 1.0/(1.2 + 0.8485 Z_b^{-1})$, $\lambda = 13.5$, $Z_b = 1$, $T_b = 1.602 \cdot 10^{-17} \text{ J}$ ($= 100.0 \text{ eV}$), $n_b = 1 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3} \rightarrow L_{v_b} \geq 25 \text{ m}$).

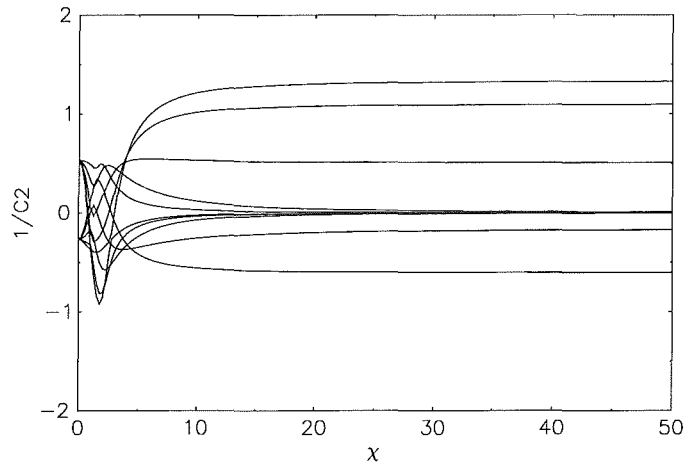


Abbildung 1.4: Untergrenzen (durchgezogene Linien) und Obergrenzen (gestrichelte Linien) für den Kehrwert $1/C_2$ für verschiedene Richtungen von χ ($\chi_{\parallel}/\chi = 0, \pi/9, 2\pi/9, \dots, \pi$). Im Bereich zwischen den Einhüllenden dieser Kurven ist der 13-Momente-Fluidansatz für die Hintergrundverteilung nicht gültig.

Kapitel 2

Numerische Lösung einer Fokker-Planck-Gleichung durch Monte-Carlo-Simulation

2.1 Die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung für Markov-Prozesse

In diesem Abschnitt sollen einige Grundtatsachen aus der Theorie der Markovschen Prozesse zusammengestellt werden. Die Darstellung orientiert sich dabei weitgehend an den Ausführungen von Gardiner (Gardiner 1985) und der dort verwendeten Notation. Für eine präzisere Grundlegung der mathematischen Details sei auf die Monographien von Arnold, Van Kampen und Feller verwiesen (Arnold 1973, Van Kampen 1981, Feller 1971).

Als stochastischer Prozeß soll ein System bezeichnet werden, welches durch eine zeitabhängige Zufallsvariable $\mathbf{X}(t)$ charakterisiert ist. Diese Zufallsvariable kann die möglichen Werte $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \dots$ etc. zu den Zeitpunkten $t_1, t_2, t_3, \dots$ annehmen. Es wird angenommen, daß ein Satz von Wahrscheinlichkeitsdichten

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots) \quad (2.1)$$

existiert, der das System vollständig beschreibt, d. h., daß die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Zufallsvariable zur Zeit t_1 einen Wert zwischen $\mathbf{x}_1$ und $\mathbf{x}_1 + d\mathbf{x}_1$, zur Zeit t_2 einen Wert zwischen $\mathbf{x}_2$ und $\mathbf{x}_2 + d\mathbf{x}_2$ usw. besitzt, durch

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 d\mathbf{x}_3 \dots \quad (2.2)$$

gegeben ist.

Weiterhin seien bedingte Wahrscheinlichkeiten definiert durch

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) &= \\
&= p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots; \mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) / p(\mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) \quad ,
\end{aligned}
\tag{2.3}$$

wobei hier wie im weiteren als Konvention die Zeitordnung

$$t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t'_1 \geq t'_2 \geq \dots \tag{2.4}$$

vorausgesetzt wird.

Ein Markov-Prozeß wird nun über bedingte Wahrscheinlichkeitsdichten definiert. Für ihn soll gelten

$$p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, t'_1; \mathbf{y}_2, t'_2; \dots) = p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \dots | \mathbf{y}_1, t'_1) \quad . \tag{2.5}$$

Gemäß oben eingeführter Zeitordnung bedeutet dies, daß die durch vorhergehende Ereignisse bedingte Entwicklung des stochastischen Prozesses zu den Zeitpunkten $t_1, t_2, \dots$ nur vom jüngsten Ereignis zur Zeit t'_1 abhängt. Die Markov-Annahme (2.5) läßt es zu, daß eine beliebige Wahrscheinlichkeitsdichte der Form (2.1) durch ein Produkt einfacher bedingter Wahrscheinlichkeitsdichten (Übergangswahrscheinlichkeiten) ausgedrückt werden kann.

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3; \dots; \mathbf{x}_n, t_n) &= \\
&= p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) \dots p(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1} | \mathbf{x}_n, t_n)
\end{aligned}
\tag{2.6}$$

Die beiden folgenden Gleichungen besitzen nun allgemeine Gültigkeit für alle stochastischen Prozesse.

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_1, t_1) &= \int p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2) d\mathbf{x}_2 \\
&= \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2) d\mathbf{x}_2
\end{aligned}
\tag{2.7}$$

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_3, t_3) &= \int p(\mathbf{x}_1, t_1; \mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) d\mathbf{x}_2 \\
&= \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_3, t_3) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) d\mathbf{x}_2
\end{aligned}$$

Verwendet man in der zweiten Gleichung die Markov-Annahme (2.5), so ergibt sich die Chapman-Kolmogorov-Gleichung

$$p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_3, t_3) = \int p(\mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_2, t_2) p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_3, t_3) d\mathbf{x}_2 \quad . \quad (2.8)$$

Die Chapman-Kolmogorov-Gleichung kann unter gewissen Bedingungen zu einer Differentialgleichung umgeformt werden, und zwar soll für die nachfolgenden Grenzprozesse für alle $\varepsilon > 0$ gelten:

$$(i) \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) = W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) \quad (2.9)$$

gleichmäßig konvergent bzgl. $\mathbf{x}$, $\mathbf{z}$ und t für $|\mathbf{x} - \mathbf{z}| \geq \varepsilon$;

$$(ii) \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} (x_i - z_i) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) d\mathbf{x} = A_i(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon) \quad (2.10)$$

gleichmäßig konvergent bzgl. $\mathbf{z}$, ε und t ;

$$(iii) \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{z}| < \varepsilon} (x_i - z_i)(x_k - z_k) p(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{z}, t) d\mathbf{x} = D_{ik}(\mathbf{z}, t) + O(\varepsilon) \quad (2.11)$$

gleichmäßig konvergent bzgl. $\mathbf{z}$, ε und t .

Sind diese Bedingungen erfüllt, so läßt sich zeigen (Gardiner 1985), daß die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} (A_i(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_k} (D_{ik}(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')) \\ &+ \int (W(\mathbf{z} | \mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t | \mathbf{y}, t') - W(\mathbf{x} | \mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')) d\mathbf{x} \quad . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Je nach Art der Koeffizienten ergeben sich hieraus verschiedene Grundgleichungen stochastischer Prozesse. Für $A_i = D_{ik} = 0$ folgt die Master-Gleichung, die Sprungprozesse beschreibt. Für $W = 0$ die Fokker-Planck-Gleichung (Diffusionsprozesse) und für $W = D_{ik} = 0$ die Liouville-Gleichung (deterministische Prozesse). (Die Benennungen unterscheiden sich in der Theorie stochastischer Prozesse von den in der Plasmaphysik üblichen!)

2.2 Fokker-Planck-Gleichung und stochastische Differentialgleichungen

Für $W = 0$ wird die Chapman-Kolmogorov-Differentialgleichung (2.12) zur Fokker-Planck-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t') &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} (A_i(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_k} (D_{ik}(\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t')) \quad . \end{aligned} \quad (2.13)$$

Der Vektor $\mathbf{A}(\mathbf{z}, t)$ wird Driftvektor und die (positiv semidefinite und symmetrische) Matrix $\mathbf{D}(\mathbf{z}, t)$ Diffusionsmatrix genannt. Den zugehörigen stochastischen Prozeß bezeichnet man als Diffusionsprozeß. Er kann folgendermaßen veranschaulicht werden: Unter Berücksichtigung der Anfangsbedingung

$$p(\mathbf{z}, t | \mathbf{y}, t) = \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y}) \quad (2.14)$$

erhält man für ein kleines Zeitintervall Δt unter Vernachlässigung höherer Terme in Δt (Gardiner 1985)

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}, t + \Delta t | \mathbf{y}, t) &= (2\pi)^{-L/2} (\det[\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)])^{-1/2} (\Delta t)^{-1/2} \times \\ &\times \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{[\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{y}, t) \Delta t]^T [\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)]^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{y}, t) \Delta t]}{\Delta t} \right) \quad . \end{aligned} \quad (2.15)$$

L ist hier die Dimension des Zufallsvektors $\mathbf{Y}(t)$. Die Wahrscheinlichkeitsdichte nach einer Zeit Δt ist also durch eine Gaußverteilung mit Mittelwert $\mathbf{y} + \mathbf{A}(\mathbf{y}, t) \Delta t$ und Kovarianzmatrix $\mathbf{D}(\mathbf{y}, t) \Delta t$ gegeben. Dies bedeutet, daß sich die Änderung der Zufallsvariablen $\mathbf{Y}(t)$ zusammensetzt aus einer systematischen Drift mit Geschwindigkeit $\mathbf{A}(\mathbf{y}, t)$ und einer Gaußschen Fluktuation mit Kovarianz $\mathbf{D}(\mathbf{y}, t) \Delta t$, was auch geschrieben werden kann als

$$\mathbf{y}(t + \Delta t) = \mathbf{y}(t) + \mathbf{A}(\mathbf{y}(t), t) \Delta t + \boldsymbol{\xi}(t) (\Delta t)^{1/2} \quad . \quad (2.16)$$

$\boldsymbol{\xi}(t)$ ist dabei ein stochastischer Term mit Mittelwert $\mathbf{0}$ und Kovarianz $\mathbf{D}(\mathbf{y}(t), t)$. Die Untersuchung solcher stochastischer Bewegungen mit diffusivem Anteil $\boldsymbol{\xi}(t) (\Delta t)^{1/2}$ führte zum Konzept der stochastischen Differentialgleichungen und der stochastischen Integration. Die Entwicklung der zugehörigen Theorie kann auf unterschiedliche Weise erfolgen, zumeist kommt das von Ito vorgeschlagene Kalkül zur Anwendung (Arnold 1973).

Die stochastische Differentialgleichung für ein System, das sich gemäß Gleichung (2.16) entwickelt, wird definiert durch

$$d\mathbf{y} = \mathbf{A}(\mathbf{y}, t) dt + \mathbf{B}(\mathbf{y}, t) d\mathbf{W}(t) \quad . \quad (2.17)$$

Darin ist $d\mathbf{W}(t)$ das Inkrement eines L -dimensionalen Wiener-Prozesses. Der Wiener-Prozeß entspricht der speziellen Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{w}, t | \mathbf{w}_0, t_0) = \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial w_i^2} p(\mathbf{w}, t | \mathbf{w}_0, t_0) \quad . \quad (2.18)$$

Es ist nun so, daß die obige stochastische Differentialgleichung (mit der Anfangsbedingung $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$ für $t = t_0$) in äquivalenter Weise denselben stochastischen Prozeß beschreibt wie die Fokker-Planck-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{y}, t | \mathbf{y}_0, t_0) &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} (A_i(\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t | \mathbf{y}_0, t_0)) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_k} ((\mathbf{B}(\mathbf{y}, t) \mathbf{B}^T(\mathbf{y}, t))_{ik} p(\mathbf{y}, t | \mathbf{y}_0, t_0)) \quad . \end{aligned} \quad (2.19)$$

Würde man eine große Zahl von Trajektorien der Zufallsvariablen $\mathbf{Y}(t)$ verfolgen (sie seien mit $\mathbf{Y}_1(t), \mathbf{Y}_2(t), \dots$ bezeichnet), ergäbe sich eine Verteilung der Werte von $\mathbf{Y}_1(t), \mathbf{Y}_2(t), \dots$ im Konfigurationsraum, die der Lösung $p(\mathbf{y}, t | \mathbf{y}_0, t_0)$ von Gleichung (2.19) entspricht und umgekehrt.

Betrachtet man $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0$ für $t = t_0$ als sicheres Ereignis, so ist $p(\mathbf{y}, t | \mathbf{y}_0, t_0) = p(\mathbf{y}, t)$ und Gleichung (2.19) wird zu

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{y}, t) &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} (A_i(\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t)) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_k} ((\mathbf{B}(\mathbf{y}, t) \mathbf{B}^T(\mathbf{y}, t))_{ik} p(\mathbf{y}, t)) \quad . \end{aligned} \quad (2.20)$$

Gleichungen dieses Typs sind häufig in der kinetischen Theorie von Plasmen anzutreffen, wie in Kapitel 1 besprochen wurde. Methoden zur numerischen Lösung dieser Gleichung bilden den Gegenstand der nächsten Abschnitte.

2.3 Die numerische Methode I: Fokker-Planck-Gleichung und Master-Gleichung

Das oben gesagte über den Zusammenhang zwischen den Trajektorien eines stochastischen Prozesses, die durch stochastische Differentialgleichungen der Form

(2.17) beschrieben werden, und der korrespondierenden Fokker-Planck-Gleichung (2.20) legt es nahe, die numerische Konstruktion von Trajektorien zur näherungsweisen Lösung einer Fokker-Planck-Gleichung zu nutzen. Ein solcher Lösungsalgorithmus ist mit einem Computer einfach zu realisieren (Kloeden, Platen und Schurz 1994, Reiser 1996). Man bedient sich einer statistisch repräsentativen Zahl von Simulationsteilchen, die zur Startzeit t_0 am Ort $\mathbf{y}_0$ lokalisiert seien ($p(\mathbf{y}, t_0) = \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0)$) und ändert ihre Koordinaten in diskreten Schritten

$$\Delta \mathbf{y} = \mathbf{A}(\mathbf{y}, t) \Delta t + \mathbf{B}(\mathbf{y}, t) \Delta \mathbf{W} \quad . \quad (2.21)$$

Die praktische Realisierung eines Inkrements ΔW_i wird dabei erreicht durch

$$\Delta W_i = (\Delta t)^{1/2} \gamma_{G,i} \quad , \quad (2.22)$$

wobei $\gamma_{G,i}$ eine gaußverteilte Zufallszahl mit Mittelwert 0 und Varianz 1 bezeichnet¹. Die Konstruktion wird so lange mit genügend kleinem Zeitschritt Δt durchgeführt, bis ein interessierender Zeitpunkt t erreicht ist. Der zugrundeliegende Konfigurationsraum für die Zufallsvariable $\mathbf{Y}(t)$ wird in ein feines Netz unterteilt, und ein abschließendes Durchzählen in diesem Netz liefert eine Näherung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\mathbf{y}, t | \mathbf{y}_0, t_0)$:

$$p(\mathbf{y}, t | \mathbf{y}_0, t_0) \approx \frac{1}{\Delta V_i} \frac{N_i}{N} \quad , \quad (2.24)$$

wobei N_i/N die relative Häufigkeit der N Simulationsteilchen im Teilvolumen ΔV_i bezeichnet. Diese Vorgehensweise kann als Analogon des Euler-Verfahrens für gewöhnliche Differentialgleichungen angesehen werden.

Zur Differenzengleichung (2.21) ist aber anzumerken, daß sie im Grunde nicht mehr einen Diffusionsprozeß beschreibt, wie es die stochastische Differentialgleichung (2.17) tut. Die Trajektorien eines Diffusionsprozesses besitzen nämlich die Eigenschaft, zwar überall stetig, jedoch nirgends differenzierbar zu sein (Gardiner 1985). Die für den numerischen Algorithmus notwendigerweise diskreten Schritte entsprechen eigentlich einem Sprungprozeß mit Pfadstücken zeitlicher Konstanz und sprunghaften Änderungen, womit der Algorithmus also eine Master-Gleichung lösen würde. Es läßt sich aber zeigen, daß die angegebene Konstruktion

¹Die Lösung des Wiener-Prozesses (2.18) in einer Dimension ($L = 1$) für einen kleinen Zeitschritt Δt lautet für die Anfangsbedingung $p(w, t | w_0, t) = \delta(w - w_0)$ (siehe Gleichung (2.15))

$$p(w, t + \Delta t | w_0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}} e^{-\frac{(w-w_0)^2}{2\Delta t}} \quad . \quad (2.23)$$

Einen Zufallsschritt ΔW , der einer solchen Wahrscheinlichkeitsdichte (Gaußverteilung mit Mittelwert 0 und Varianz Δt) entspricht, erhält man nach der allgemeinen Vorschrift $\sigma \gamma + m$, worin γ eine gaußverteilte Zufallszahl mit Mittelwert 0 und Varianz 1 bezeichnet, σ^2 die gewünschte Varianz und m der gewünschte Mittelwert ist.

einen Prozeß liefert, der zu einer Klasse von Prozessen gehört, die für genügend kleine Δt den gewünschten Diffusionsprozeß (2.17) approximieren.

Gilt für die Übergangswahrscheinlichkeiten $W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t)$ einer Master-Gleichung

$$\frac{\partial p(\mathbf{y}, t)}{\partial t} = \int (W_\delta(\mathbf{y}|\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t) - W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t)) d\mathbf{z} \quad , \quad (2.25)$$

die von einem Parameter δ abhängen, daß für alle $\varepsilon > 0$:

$$(i) \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) = 0 \quad (2.26)$$

gleichmäßig konvergent bzgl. $\mathbf{z}$, $\mathbf{y}$ und t für $|\mathbf{z} - \mathbf{y}| \geq \varepsilon$,

$$(ii) \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{|\mathbf{z}-\mathbf{y}| < \varepsilon} (z_i - y_i) W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} = A_i(\mathbf{y}, t) + O(\varepsilon) \quad (2.27)$$

gleichmäßig konvergent bzgl. $\mathbf{y}$, ε und t ,

$$(iii) \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{|\mathbf{z}-\mathbf{y}| < \varepsilon} (z_i - y_i)(z_k - y_k) W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} = D_{ik}(\mathbf{y}, t) + O(\varepsilon) \quad (2.28)$$

gleichmäßig konvergent bzgl. $\mathbf{y}$, ε und t ,

so geht die Master-Gleichung für $\delta \rightarrow 0$ in die Fokker-Planck-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{y}, t) &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} (A_i(\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t)) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_k} ((B(\mathbf{y}, t) B^T(\mathbf{y}, t))_{ik} p(\mathbf{y}, t)) \end{aligned} \quad (2.29)$$

über. Eine Herleitung der Gleichung (2.29) aus der Gleichung (2.25) unter den genannten Bedingungen ist im Anhang C angegeben.

Betrachtet man nun den Zeitschritt Δt als Parameter δ , so schreibt sich gemäß Gleichung (2.15) die Übergangswahrscheinlichkeit unseres Sprungprozesses (2.21)

$$\begin{aligned} W_{\Delta t}(\mathbf{z}|\mathbf{y}) &= (2\pi)^{-L/2} (\det[\mathbf{D}(\mathbf{z}, t)])^{-1/2} (\Delta t)^{-3/2} \times \\ &\times \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{[\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{y}, t) \Delta t]^T [\mathbf{D}(\mathbf{y}, t)]^{-1} [\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A}(\mathbf{y}, t) \Delta t]}{\Delta t} \right) \end{aligned} \quad (2.30)$$

mit

$$\mathbf{D}(\mathbf{y}, t) = \mathbf{B}(\mathbf{y}, t) \mathbf{B}^T(\mathbf{y}, t) \quad , \quad (2.31)$$

und es ergibt sich aus den wohlbekannten Eigenschaften der mehrdimensionalen Gaußverteilung, daß die Forderungen (2.26), (2.27) und (2.28) erfüllt sind, unser numerischer Sprungprozeß (2.21) für $\Delta t \rightarrow 0$ also tatsächlich den gewünschten Diffusionsprozeß (2.17) annähert.

Die Konstruktionsvorschrift (2.21) ist immer anwendbar, doch kann es vom numerischen Standpunkt gesehen effektivere Sprungprozesse geben, die denselben Diffusionsprozeß annähern. Ein wichtiges Beispiel sei noch genannt: Die Konstruktion der Trajektorien mit Hilfe der Differenzengleichungen

$$\Delta y_i = A_i(\mathbf{y}, t) \Delta t + \sum_k B_{ik}(\mathbf{y}, t) \sqrt{\Delta t} \eta_k \quad (2.32)$$

mit Zufallszahlen η_k , die mit gleicher Wahrscheinlichkeit nur die Werte $+1$ oder -1 annehmen können, entspricht einem Sprungprozeß mit Übergangswahrscheinlichkeit

$$W_{\Delta t}(\mathbf{Z}|\mathbf{y}, t) = \frac{1}{2^{L-1} \Delta t} \sum_{\alpha} \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A} \Delta t + \mathbf{B} \boldsymbol{\eta}^{\alpha} \Delta t) + \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y} - \mathbf{A} \Delta t - \mathbf{B} \boldsymbol{\eta}^{\alpha} \Delta t) \quad , \quad (2.33)$$

worin $\boldsymbol{\eta}^{\alpha}$ ein Vektor ist, dessen Komponenten nur die Werte ± 1 annehmen können und der Index α die Hälfte der 2^L möglichen Kombinationen der Komponentenwerte bezeichnet (L ist wieder die Dimension des Zufallvektors $\mathbf{y}$). Für diese Sprungwahrscheinlichkeit gilt:

(i)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} W_{\Delta t}(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) = 0 \quad \text{für} \quad \mathbf{z} \neq \mathbf{y} \quad (2.34)$$

(ii)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int (z_i - y_i) W_{\Delta t}(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} = \frac{2^{L-2}}{2^{L-1} \Delta t} (A_i(\mathbf{y}, t) \Delta t + A_i(\mathbf{y}, t) \Delta t) = A_i(\mathbf{y}, t) \quad (2.35)$$

(iii)

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int (z_i - y_i)(z_k - y_k) W_{\Delta t}(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} = \frac{1}{2^{L-1}} \sum_{\alpha} \sum_{m,n} B_{im} B_{nk}^T \eta_m^{\alpha} \eta_n^{\alpha} \quad . \quad (2.36)$$

Für die Summe über α im letzten Ausdruck erhält man

$$\begin{aligned} n \neq m & : \frac{1}{2^{L-1}} \sum_{\alpha} \eta_n^{\alpha} \eta_m^{\alpha} = \frac{2^{L-3}}{2^{L-1}} (+1 - 1 - 1 + 1) = 0 \\ n = m & : \frac{1}{2^{L-1}} \sum_{\alpha} \eta_n^{\alpha} \eta_n^{\alpha} = \frac{2^{L-2}}{2^{L-1}} (+1 + 1) = 1 \quad , \end{aligned} \quad (2.37)$$

und somit

$$\frac{1}{2^{L-1}} \sum_{\alpha} \sum_{n,m} B_{im} B_{nk}^T \eta_m^{\alpha} \eta_n^{\alpha} = \sum_m B_{im} B_{mk}^T \quad . \quad (2.38)$$

Das heißt, daß auch dieser Sprungprozeß für eine Approximation des interessierenden Diffusionsprozesses geeignet ist. Für welche numerische Prozedur man sich entscheidet, ist abhängig von den Anforderungen an die Genauigkeit und Effizienz der Rechnung. Der Sprungprozeß (2.21) erlaubt größere Zeitschritte Δt , wohingegen der Sprungprozeß (2.32) weniger Rechenaufwand zur Generierung der Zufallszahlen benötigt.

Anhand von drei analytisch lösbaren Fokker-Planck-Gleichungen soll nun die numerische Prozedur demonstriert werden.

2.3.1 Beispiel 1: Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß (1-dimensional)

Als Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß bezeichnet man einen stochastischen Prozeß, der durch die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (K \cdot x \cdot p(x, t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (D \cdot p(x, t)) \quad (2.39)$$

beschrieben wird. Er dient als einfaches Modell für eine eindimensionale Brownsche Bewegung. Die Koeffizienten K und D sind Konstanten. Für die Anfangsbedingung

$$p(x, t = 0) = \delta(x) \quad , \quad (2.40)$$

lautet die Lösung

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2(t)}\right) \quad (2.41)$$

mit

$$\sigma^2(t) = \frac{D}{2K} (1 - \exp(-2Kt)) \quad . \quad (2.42)$$

Dies ist eine Gaußverteilung mit Mittelwert 0 und zeitlich veränderlicher Varianz $\sigma^2(t)$. Für $t \rightarrow \infty$ strebt $p(x, t)$ gegen die stationäre Lösung $p_s(x)$

$$p_s(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi D/K}} \exp\left(-\frac{K}{D}x^2\right) \quad . \quad (2.43)$$

Die Gleichung (2.39) wurde von uns mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode gelöst und das Ergebnis mit dem analytischen Ausdruck (2.41) verglichen. Verwendet wurden die Parameter $K = 1 \cdot 10^3$ und $D = 1 \cdot 10^{12}$ und ein Zeitschritt von $\Delta t = 1 \cdot 10^{-5}$. Die stochastische Differenzengleichung für die Simulation lautete

$$\Delta x = -K x \Delta t + \sqrt{D} \Delta W \quad . \quad (2.44)$$

In den Abbildungen 2.1 und 2.2 werden die berechneten Wahrscheinlichkeitsdichten $p(x, t)$ für zwei verschiedene Zeiten t gezeigt. Zum Test des Rechenaufwandes wurden jeweils drei verschiedene Teilchenzahlen in der Simulation verwendet. Zusätzlich zu den berechneten Wahrscheinlichkeitsdichten wurde die analytische Gaußkurve (2.41) eingezeichnet. Die Abbildungen zeigen für die berechneten Wahrscheinlichkeitsdichten einen unregelmäßigen Verlauf, der aber mit steigender Teilchenzahl in der Simulation glatter wird und sich der analytischen Gaußkurve annähert.

In Tabelle 2.1 sind außerdem die berechneten Mittelwerte und Varianzen von x ($\tilde{m}$, $\tilde{\sigma}^2$) und die analytisch gegebenen (m , σ^2) aufgeführt, wobei

$$m = \langle x \rangle = \int x p(x, t) dx \quad (2.45)$$

$$\sigma^2 = \langle (x - m)^2 \rangle = \int (x - m)^2 p(x, t) dx$$

ist. Man erkennt, daß bereits die unregelmäßig erscheinenden Wahrscheinlichkeitsdichten aus den Rechnungen mit 1000 Teilchen nur wenig von den exakten Resultaten abweichende Werte für $\tilde{m}$ und $\tilde{\sigma}^2$ liefert.

Im oberen Diagramm der Abbildung 2.3 wird der Verlauf der Varianz $\tilde{\sigma}^2(t)$ aus einer Simulation mit 10000 Teilchen gezeigt. Ebenfalls eingezeichnet ist die Kurve der analytischen Funktion $\sigma^2(t)$ aus Gleichung (2.42). Die Übereinstimmung ist augenscheinlich sehr gut. Um dies zu präzisieren, wird im unteren Diagramm die prozentuale Abweichung

$$\Delta\sigma^2 = 100 \cdot \frac{\tilde{\sigma}^2 - \sigma^2}{\sigma^2} \quad (2.46)$$

dargestellt. Man erkennt, daß die Abweichung meistens ca. 1-3 % beträgt. Zusätzlich sind die 95 %-Konfidenzintervalle für die berechneten Mittelwerte

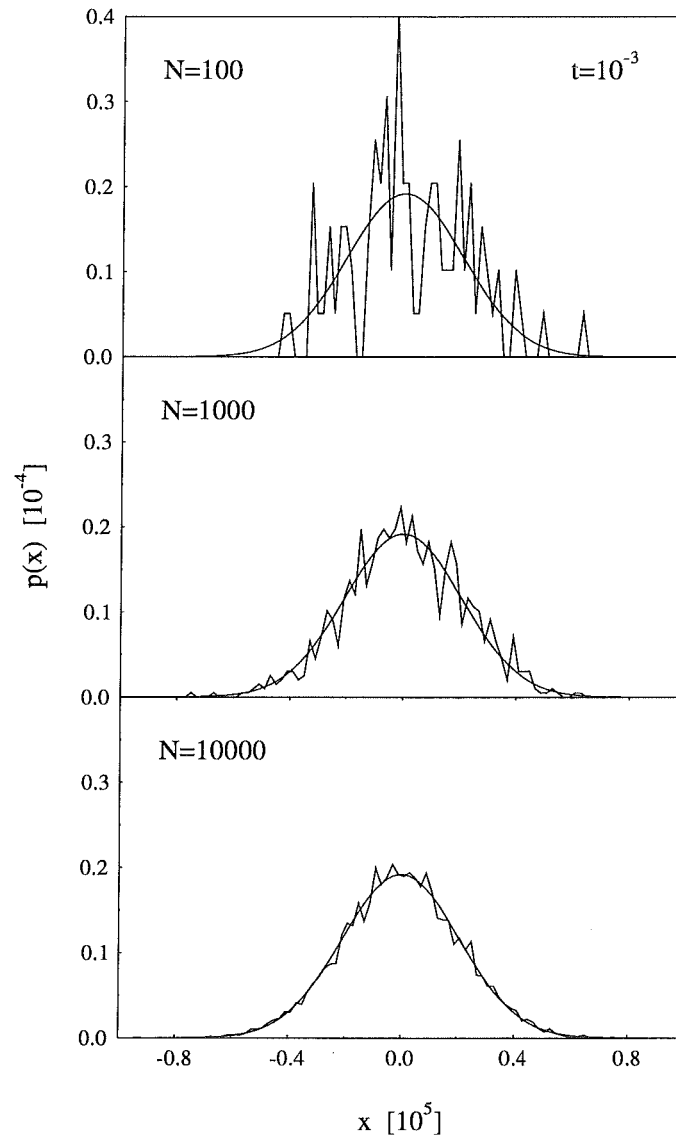


Abbildung 2.1: Berechnete Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x, t)$ zur Zeit $t = 10^{-3}$ für verschiedene Teilchenzahlen N im Vergleich mit der analytischen Lösung (2.41).

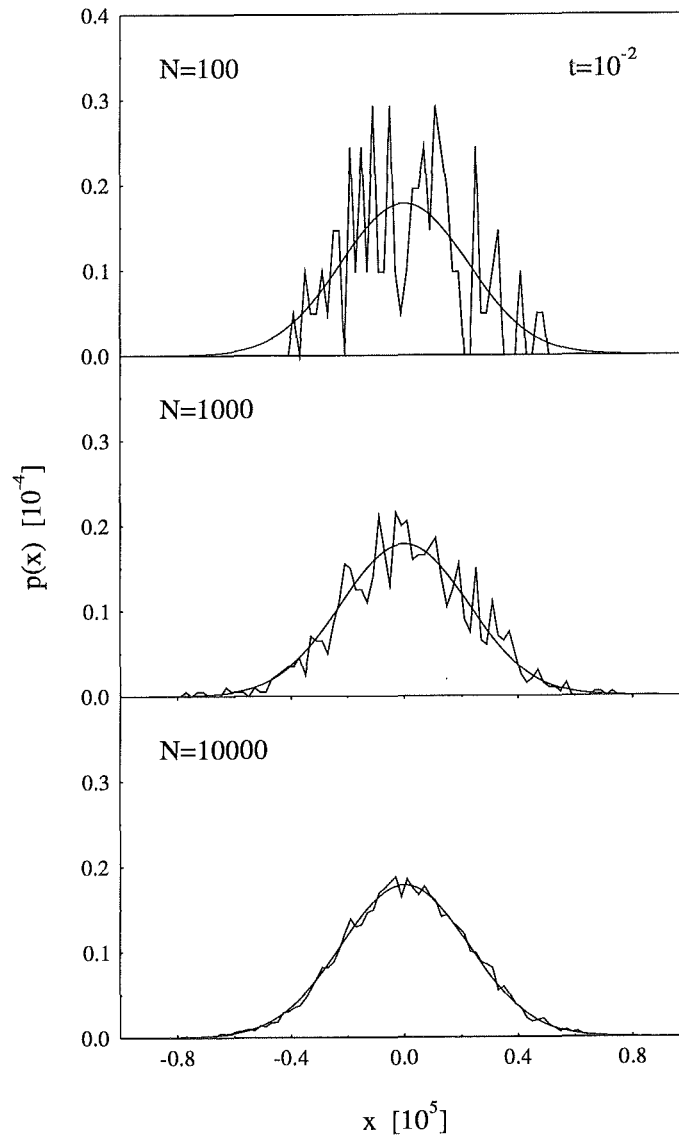


Abbildung 2.2: Berechnete Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x, t)$ zur Zeit $t = 10^{-2}$ für verschiedene Teilchenzahlen N im Vergleich mit der analytischen Lösung (2.41).

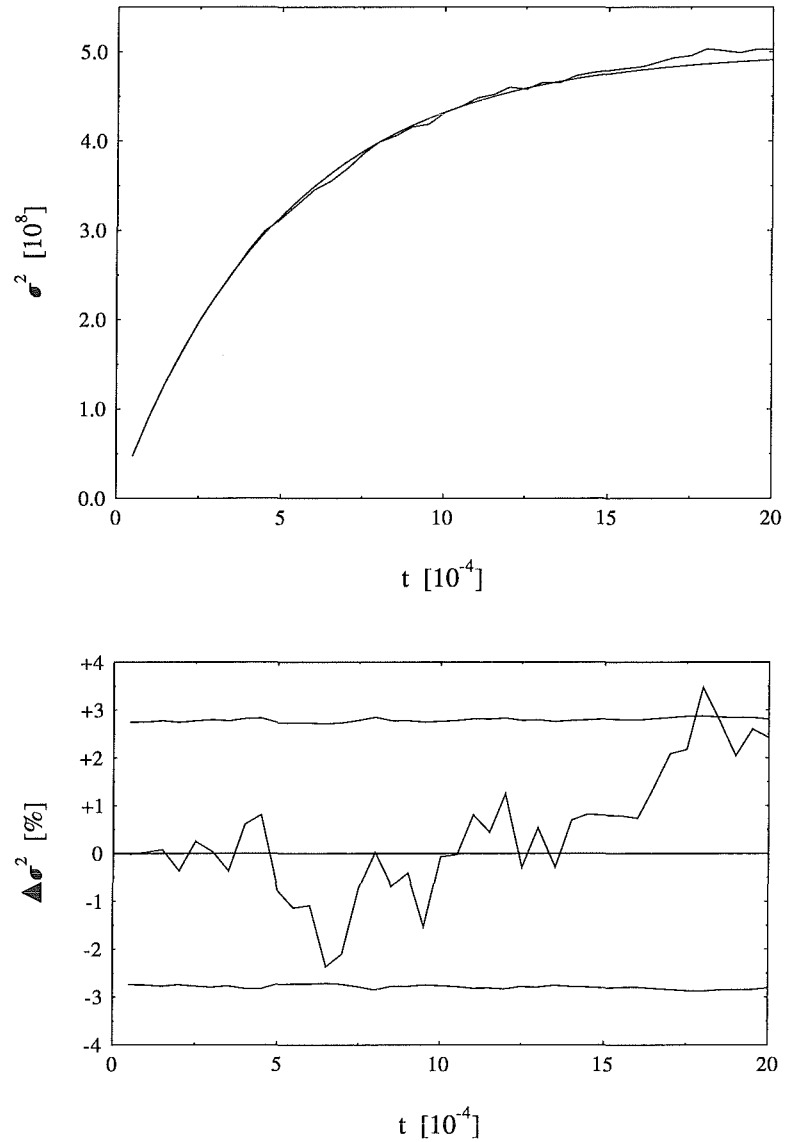


Abbildung 2.3: Oben: Berechnetes und analytisches Resultat für die Varianz $\sigma^2(t)$ des O. -U. -Prozesses (siehe (2.42)). Für die Rechnung wurden 10000 Simulationsteilchen verwendet. Unten: Prozentuale Abweichung der berechneten Resultate von den analytischen. Die punktierten Linien kennzeichnen die 95 %-Konfidenzintervalle.

$\langle x^2 \rangle$ (als Näherung für die Konfidenzintervalle von $\hat{\sigma}^2$) eingezeichnet. Die Konfidenzintervalle sind die Intervalle, in denen mit einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeit α der wahre Mittelwert von x^2 liegt, wobei wir hier $\alpha = 0.95$ wählten. Ihre Bestimmung beruht auf der Aussage des zentralen Grenzwertsatzes (Fisz 1970, Abschnitt 6.8), daß die Folge der Summen y_N über die zufälligen Ereignisse x_i^2

$$y_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad (2.47)$$

für $N \rightarrow \infty$ normalverteilt mit Mittelwert m und Varianz σ^2 ist. Dabei wurde vorausgesetzt, daß die x_i^2 voneinander unabhängige Zufallsereignisse mit Mittelwert m und Varianz σ^2 seien. Die Zahl $N = 10000$ im obigen Beispiel ist ausreichend groß für die Gültigkeit der Aussage des zentralen Grenzwertsatzes und es läßt sich folgende Wahrscheinlichkeit dafür angeben, daß der genäherte Mittelwert $\langle x^2 \rangle$ über $N = 10000$ Teilchen sich im Bereich $m \pm 1.96 \cdot \sigma / \sqrt{N}$ um den wahren Mittelwert m befindet (Fisz 1970, Abschnitt 13.8, Bowman 1987, Müller 1991)

$$P \left(-\frac{1.96}{\sqrt{N}} \sigma \leq \langle x^2 \rangle - m \leq \frac{1.96}{\sqrt{N}} \sigma \right) = 0.95 \quad . \quad (2.48)$$

Mit den Näherungen

$$m \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad ; \quad \sigma^2 \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^4 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \right)^2 \quad (2.49)$$

ergeben sich die Konfidenzintervalle zu

$$\langle x^2 \rangle \pm 1.96 \cdot \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^4 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \right)^2}{N}} \quad , \quad (2.50)$$

worin die x_i die Werte von x sind, die die einzelnen Simulationsteilchen zu einer betrachteten Zeit annehmen.

Zur besseren Darstellung bezogen wir die Konfidenzintervalle auf den wahren (den analytischen) Mittelwert $\sigma^2(t)$. Man erkennt, daß unsere Rechenresultate tatsächlich in maximal 5 % der Fälle außerhalb des Konfidenzintervalls liegen und man für unsere Rechnung eine Genauigkeit von mindestens ± 3 % annehmen kann.

t	N	$\tilde{m}$	$\tilde{\sigma}^2$	m	σ^2
10^{-3}	100	$1.72 \cdot 10^3$	$4.37 \cdot 10^8$	0.0	$4.32 \cdot 10^8$
10^{-3}	1000	$7.27 \cdot 10^2$	$4.33 \cdot 10^8$	0.0	$4.32 \cdot 10^8$
10^{-3}	10000	$1.18 \cdot 10^2$	$4.38 \cdot 10^8$	0.0	$4.32 \cdot 10^8$
10^{-2}	100	$1.14 \cdot 10^3$	$3.92 \cdot 10^8$	0.0	$5.00 \cdot 10^8$
10^{-2}	1000	$8.07 \cdot 10^2$	$4.97 \cdot 10^8$	0.0	$5.00 \cdot 10^8$
10^{-2}	10000	$3.56 \cdot 10^2$	$4.98 \cdot 10^8$	0.0	$5.00 \cdot 10^8$

Tabelle 2.1: Berechnete ($\tilde{m}$, $\tilde{\sigma}^2$) und analytische (m , σ^2) Momente für die O.-U.-Prozesse der Abbildungen 2.1 und 2.2.

2.3.2 Beispiel 2: Coulomb-Wechselwirkung (2-dimensional)

In diesem Abschnitt soll ein Spezialfall der im Abschnitt 1.3 abgeleiteten driftkinetischen Gleichung (1.61) betrachtet werden. Zu den Variablenbezeichnungen sei auf die dort gegebenen Erläuterungen und auf Anhang B verwiesen.

Berücksichtigt man in der driftkinetischen Gleichung (1.61) ausschließlich die Coulomb-Wechselwirkung, betrachtet also quasi ein reines Relaxationsproblem, so erhält man die Gleichung (der Index Z wird hier weggelassen)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}(v_{\parallel}, v_{\perp}, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (K_{\parallel} \bar{f}) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (K_{\perp} \bar{f}) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} (D_{\parallel\parallel} \bar{f}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} (D_{\parallel\perp} \bar{f}) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} (D_{\perp\parallel} \bar{f}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} (D_{\perp\perp} \bar{f}) \quad .
\end{aligned} \tag{2.51}$$

In diesem Beispiel soll die Wechselwirkung von Testteilchen mit einem maxwellverteilten Hintergrund ohne Störung behandelt werden. Die Koeffizienten (2.51) sind dann gegeben durch

$$\begin{aligned}
K_{\parallel} &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \phi'_0 \\
K_{\perp} &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha \frac{\chi_{\perp}}{\chi} \phi'_0 + \frac{1}{2} \Lambda \alpha \frac{1}{v_{\perp}^2} \frac{\chi_{\perp}}{\chi} \psi'_0 \\
D_{\parallel\parallel} &= \Lambda \alpha^2 \left(\frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \psi''_0 - \frac{\chi_{\perp}^2}{\chi^2} \frac{\psi'_0}{\chi} \right) \\
D_{\parallel\perp} &= \Lambda \alpha^2 \left(\frac{\chi_{\parallel}\chi_{\perp}}{\chi^2} \psi''_0 - \frac{\chi_{\parallel}\chi_{\perp}}{\chi^2} \frac{\psi'_0}{\chi} \right) \\
D_{\perp\parallel} &= \Lambda \alpha^2 \left(\frac{\chi_{\parallel}\chi_{\perp}}{\chi^2} \psi''_0 - \frac{\chi_{\parallel}\chi_{\perp}}{\chi^2} \frac{\psi'_0}{\chi} \right) \\
D_{\perp\perp} &= \Lambda \alpha^2 \left(\frac{\chi_{\perp}^2}{\chi^2} \psi''_0 - \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2} \frac{\psi'_0}{\chi} \right)
\end{aligned} \tag{2.52}$$

mit

$$\Lambda = \lambda \frac{Z^2 Z_b^2 e^4}{4\pi\epsilon_0^2 m^2} n_b \quad ; \quad \alpha = \sqrt{\frac{m_b}{2T_b}} \tag{2.53}$$

$$\chi_{\parallel} = \alpha (v_{\parallel} - v_b) \quad ; \quad \chi_{\perp} = \alpha v_{\perp} \quad ; \quad \chi = \sqrt{\chi_{\parallel}^2 + \chi_{\perp}^2} \quad .$$

Die stationären Lösungen $\bar{f}_s$ der Gleichung (2.51) sind nach dem H-Theorem ein Produkt aus Maxwell-Verteilungen, wobei die Mittelwerte und Varianzen (mittlere Strömungsgeschwindigkeit und Temperatur) die der Verteilung der Hintergrundteilchen sind, d. h.

$$\bar{f}_s(v_{\parallel}, v_{\perp}) = \frac{1}{2\pi} \bar{f}_s(v_{\parallel}) \bar{f}_s(v_{\perp}) \quad , \tag{2.54}$$

mit

$$\begin{aligned}
\bar{f}_s(v_{\parallel}) &= \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \bar{f}_s(v_{\parallel}, v_{\perp}) d\varphi dv_{\perp} = \left(\frac{m}{2\pi T_b}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m}{2T_b} (v_{\parallel} - v_b)^2\right) \\
\bar{f}_s(v_{\perp}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \bar{f}_s(v_{\parallel}, v_{\perp}) d\varphi dv_{\parallel} = v_{\perp} \frac{m}{T_b} \exp\left(-\frac{m}{2T_b} v_{\perp}^2\right) \quad .
\end{aligned} \tag{2.55}$$

In der Simulation wählten wir für die Parameter typische Werte für Anwendungen in Tokamak-Plasmen

$$m = 2.007 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \quad (\text{Kohlenstoff}) \quad ; \quad m_b = 3.345 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad (\text{Deuterium})$$

$$Z = 1 \quad ; \quad Z_b = 1 \quad ; \quad n_b = 5 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$$

$$v_b = 1 \cdot 10^4 \text{ m/s} \quad ; \quad \lambda = 13.5 \quad ; \quad \Delta t = 1 \cdot 10^{-7} \text{ s} \quad . \quad (2.56)$$

Die Differenzengleichungen für die Simulation lauteten

$$\begin{aligned} \Delta v_{\parallel} &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \phi'_0 \Delta t \\ &\quad + \sqrt{\Lambda \alpha^2 \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \psi''_0 \Delta t} \gamma_1 - \sqrt{\Lambda \alpha^2 \frac{\chi_{\perp}}{\chi} \frac{\psi'_0}{\chi} \Delta t} \gamma_2 \\ \Delta v_{\perp} &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha \frac{\chi_{\perp}}{\chi} \phi'_0 \Delta t + \frac{1}{2} \Lambda \alpha \frac{1}{v_{\perp}^2} \frac{\chi_{\perp}}{\chi} \psi'_0 \Delta t \\ &\quad + \sqrt{\Lambda \alpha^2 \frac{\chi_{\perp}}{\chi} \psi''_0 \Delta t} \gamma_1 - \sqrt{\Lambda \alpha^2 \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \frac{\psi'_0}{\chi} \Delta t} \gamma_2 \quad , \end{aligned} \quad (2.57)$$

mit zwei voneinander unabhängigen gaußverteilten Zufallszahlen γ_1 und γ_2 mit Mittelwert 0 und Varianz 1.

Abbildung 2.4 zeigt die Resultate aus einer Monte-Carlo-Simulation für die Verteilungsfunktionen $\bar{f}(v_{\parallel}, t)$ und $\bar{f}(v_{\perp}, t)$ zur Zeit $t = 1 \cdot 10^{-3} \text{ s}$. In der Rechnung wurden 10000 Simulationsteilchen verwendet. Ebenfalls eingezeichnet sind die analytischen Lösungen (2.55) für den stationären Fall. Man erkennt, daß die Resultate der Simulation für $t = 1 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ bereits sehr gut die stationäre Lösung annähern.

In Abbildung 2.5 oben wird der zeitliche Verlauf der Energien $E_{\parallel}$ und $E_{\perp}$ aus der Simulation mit 10000 Teilchen dargestellt.

$$\begin{aligned} E_{\parallel}(t) &= \frac{1}{2} m \int_{-\infty}^{+\infty} v_{\parallel}^2 \bar{f}(v_{\parallel}, t) dv_{\parallel} \\ E_{\perp}(t) &= \frac{1}{2} m \int_0^{+\infty} v_{\perp}^2 \bar{f}(v_{\perp}, t) dv_{\perp} \quad . \end{aligned} \quad (2.58)$$

Es wird deutlich, daß bereits nach $5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ die Werte $E_{\parallel}^s$ und $E_{\perp}^s$ für die stationären Verteilungen erreicht werden. Sie sind gegeben durch

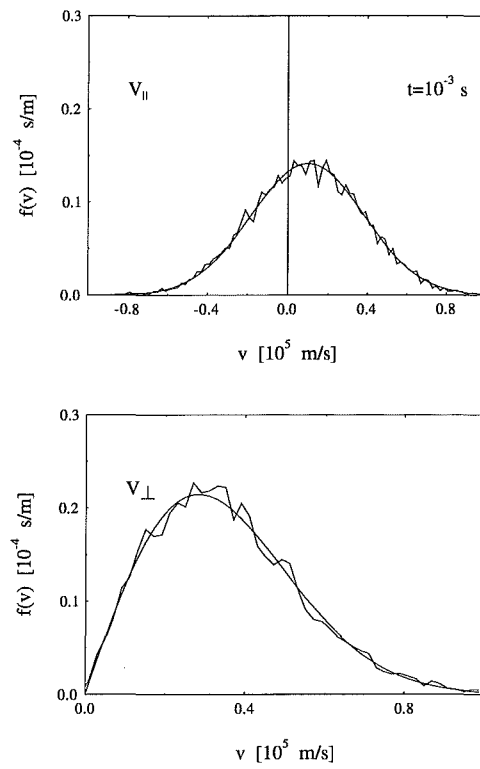


Abbildung 2.4: Berechnete Wahrscheinlichkeitsdichten $\bar{f}(v_{\parallel}, t)$ und $\bar{f}(v_{\perp}, t)$ zur Zeit $t = 10^{-3} \text{ s}$ im Vergleich mit den analytischen Lösungen (2.55).

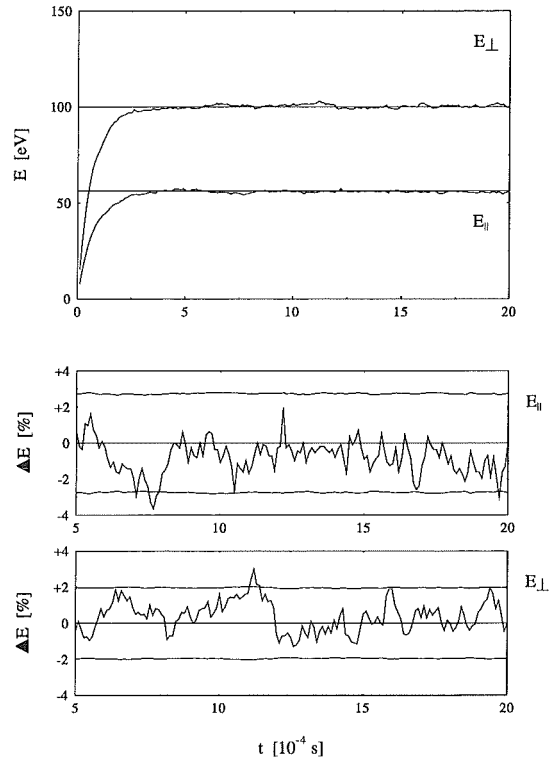


Abbildung 2.5: Oben: Zeitlicher Verlauf der Energien $E_{\parallel}$ und $E_{\perp}$ in der Simulation. Die Werte für die stationäre Situation sind durch waagrechte Linien gekennzeichnet. Unten: Prozentuale Abweichungen der berechneten Werte für die Energien ($t > 5 \cdot 10^{-4}$ s) von den analytischen Werten für den stationären Fall. Die punktierten Linien kennzeichnen die 95 %-Konfidenzintervalle.

$$\begin{aligned}
E_{\parallel}^s &= \frac{1}{2} m \int_{-\infty}^{+\infty} v_{\parallel}^2 \bar{f}_s(v_{\parallel}, t) dv_{\parallel} = \frac{1}{2} T_b + \frac{1}{2} m v_b^2 = 56.3 \text{ eV} \\
E_{\perp}^s &= \frac{1}{2} m \int_0^{+\infty} v_{\perp}^2 \bar{f}_s(v_{\perp}, t) dv_{\perp} = T_b = 100.0 \text{ eV} .
\end{aligned}
\tag{2.59}$$

Die Diagramme in Abbildung 2.5 unten zeigen die prozentualen Abweichungen

$$\Delta E_{\parallel} = 100 \cdot \frac{E_{\parallel}(t) - E_{\parallel}^s}{E_{\parallel}^s} ; \quad \Delta E_{\perp} = 100 \cdot \frac{E_{\perp}(t) - E_{\perp}^s}{E_{\perp}^s} \tag{2.60}$$

der Energien aus der Rechnung von den analytischen Werten. Ebenfalls eingezeichnet sind die 95 %-Konfidenzintervalle (2.50) für die berechneten Energien. Die Abweichungen liegen fast durchweg innerhalb der theoretischen Fehlergrenzen. Die Genauigkeit der Resultate läßt sich mit mindestens ± 3 % angeben.

2.3.3 Beispiel 3: Coulomb-Wechselwirkung (3-dimensional)

Im letzten Beispiel soll der Sonderfall

$$\frac{\partial f(\mathbf{v}, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} (K_i f) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial v_i \partial v_k} (D_{ik} f) \tag{2.61}$$

der kinetischen Gleichung (1.14) betrachtet werden. Ebenso wie im letzten Beispiel sollen die Testteilchen mit einem maxwell-verteilten Hintergrund wechselwirken. Die Koeffizienten K_i und D_{ik} sind dann gegeben durch (siehe auch Anhang B):

$$\begin{aligned}
K_i &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha \frac{\chi_i}{\chi} \phi_0' \\
D_{ik} &= \Lambda \alpha^2 \left(\left(\delta_{ik} - \frac{\chi_i \chi_k}{\chi^2} \right) \frac{\psi_0'}{\chi} + \frac{\chi_i \chi_k}{\chi^2} \psi_0'' \right) .
\end{aligned}
\tag{2.62}$$

mit

$$\chi_i = \alpha (v_i - v_{bi}) \tag{2.63}$$

und α und Λ wie in Gleichung (2.53). Der Coulomb-Term für diesen Fall ist in der Literatur oft behandelt worden (Trubnikov 1965). Üblicherweise werden dabei die folgenden Koeffizienten definiert

$$\begin{aligned}
\langle \Delta v_{\parallel} \rangle &= \left(1 + \frac{m}{m_b}\right) \Lambda \alpha \phi'_0 = -\frac{\chi}{\alpha \tau_s} \\
\langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle &= \Lambda \alpha^2 \psi''_0 = \frac{1}{4} \frac{\chi^2}{\alpha^2 \tau_{\varepsilon}} \\
\langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle &= 2\Lambda \alpha^2 \frac{\psi'_0}{\chi} = \frac{\chi^2}{\alpha^2 \tau_d} .
\end{aligned} \tag{2.64}$$

Die Größen τ_s , τ_{ε} und τ_d werden Slowing-Down-Time, Energy-Exchange-Time und Deflection-Time genannt. Sie wurden erstmals von Spitzer (Spitzer 1956) definiert. Die Indizes $\parallel$ und $\perp$ beziehen sich nicht auf ein magnetisches Feld, dieses tritt in den Gleichungen (2.64) noch nicht auf. Vielmehr bezeichnet $\parallel$ die Geschwindigkeitsrichtung eines individuellen Teilchens, das mit den maxwellverteilten Hintergrundteilchen wechselwirkt. Die Deflection-Time beschreibt damit eine Änderung der Testteilchengeschwindigkeit senkrecht zu seiner momentanen Bewegungsrichtung.

Für den stationären Fall der obigen Gleichung (2.61) gilt wie beim Beispiel des zweidimensionalen Coulomb-Terms im letzten Abschnitt, daß die Lösung durch eine Maxwell-Verteilung mit der mittleren Driftgeschwindigkeit $\mathbf{v}_b$ und der Temperatur T_b der Hintergrundteilchen gegeben ist:

$$f_s(\mathbf{v}) = f_s(v_x) f_s(v_y) f_s(v_z) \tag{2.65}$$

mit

$$f_s(v_i) = \left(\frac{m}{2\pi T_b}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m}{2T_b} (v_i - v_{bi})^2\right) . \tag{2.66}$$

In der Simulation verwendeten wir wieder die Parameter (2.56) mit dem Unterschied, daß nun

$$v_{bx} = 0 \quad ; \quad v_{by} = 0 \quad ; \quad v_{bz} = 1 \cdot 10^4 \text{ m/s} \tag{2.67}$$

der dreidimensionale Vektor der Hintergrunddriftgeschwindigkeit ist. Die Differenzgleichungen für die Simulation lauten nun unter Verwendung der oben eingeführten Abkürzungen

$$\begin{aligned}
\Delta v_i &= \hat{n}_{1i} \langle \Delta v_{\parallel} \rangle \Delta t + \hat{n}_{1i} \sqrt{\langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle \Delta t} \gamma_1 \\
&+ \hat{n}_{2i} \sqrt{\frac{1}{2} \langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle \Delta t} \gamma_2 + \hat{n}_{3i} \sqrt{\frac{1}{2} \langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle \Delta t} \gamma_3 .
\end{aligned} \tag{2.68}$$

γ_1, γ_2 und γ_3 sind wieder gaußverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert 0 und Varianz 1. Die $\hat{n}_{1i}, \hat{n}_{2i}$ und $\hat{n}_{3i}$ sind Komponenten von Einheitsvektoren, die ein rechtshändiges System bilden, wobei gelten soll

$$\hat{n}_1 = \frac{\chi}{\chi} \quad . \quad (2.69)$$

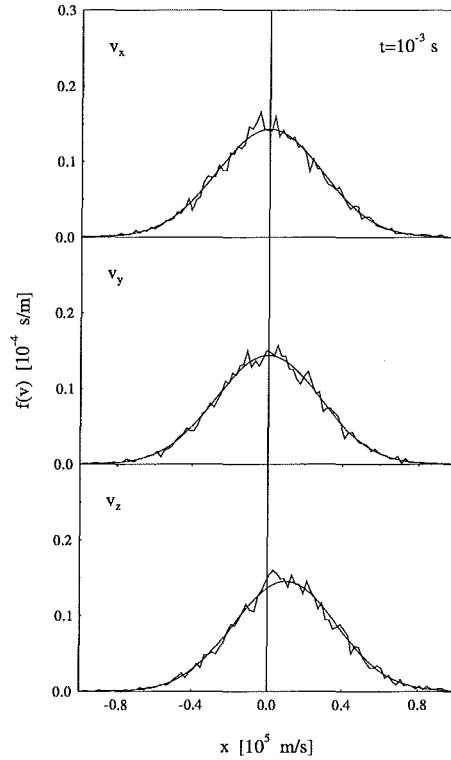


Abbildung 2.6: Berechnete Wahrscheinlichkeitsdichten $f(v_x, t)$, $f(v_y, t)$ und $f(v_z, t)$ zur Zeit $t = 10^{-3} \text{ s}$ im Vergleich mit den analytischen Lösungen (2.66).

In Abbildung 2.6 sind die Resultate aus einer Monte-Carlo-Simulation zur Berechnung der Verteilungsfunktionen $f(v_x, t)$, $f(v_y, t)$ und $f(v_z, t)$ für die Zeit $t = 1 \cdot 10^{-3} \text{ s}$ zu sehen. Auch hierbei wurden 10000 Simulationsteilchen verwendet und zum Vergleich die analytischen Lösungen (2.66) für den stationären Fall eingezeichnet.

die Abbildung 2.7 zeigt den zeitlichen Verlauf der Energien

$$E_i(t) = \frac{1}{2} m \int_{-\infty}^{+\infty} v_i^2 f(v_i, t) dv_i \quad (2.70)$$

in der Simulation mit 10000 Teilchen. Da hier dieselben Parameter wie im letzten Beispiel zugrundelagen, werden auch hier die Werte E_i^s für die stationäre

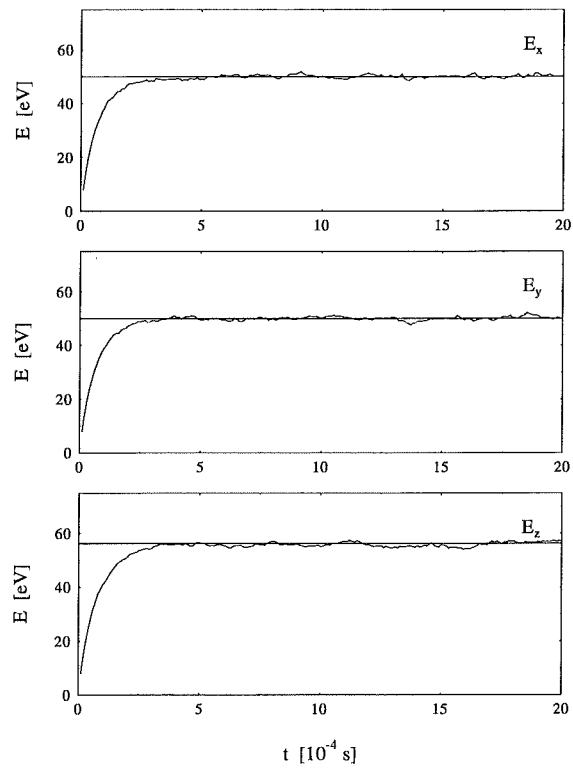


Abbildung 2.7: Zeitlicher Verlauf der Energien $E_i(t)$ in der Simulation mit 10000 Teilchen. Die Werte für die stationäre Situation sind durch waagrechte Linien gekennzeichnet.

Verteilung nach etwa $5 \cdot 10^{-4}$ s angenommen.

$$E_i^s = \frac{1}{2} m \int_{-\infty}^{+\infty} v_i^2 f_s(v_i) dv_i = \begin{cases} 50.0 \text{ eV} & \text{für } i = x, y \\ 56.3 \text{ eV} & \text{für } i = z \end{cases} \quad (2.71)$$

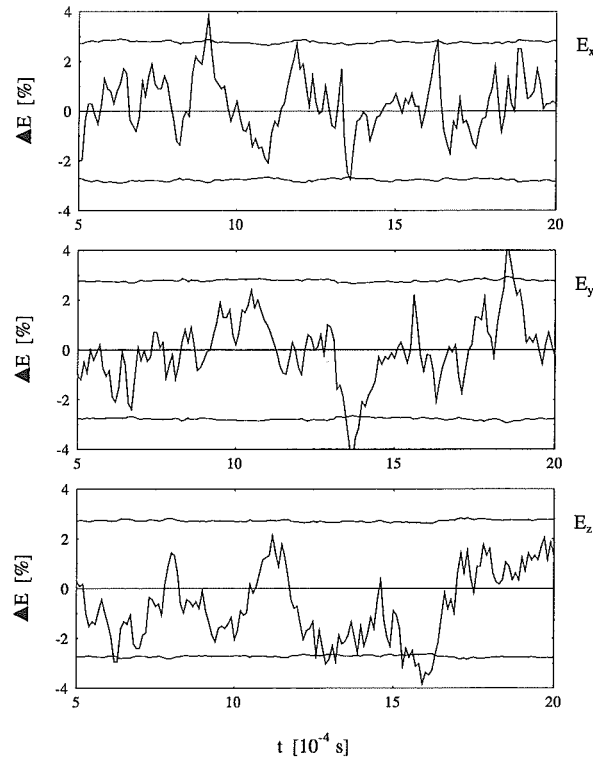


Abbildung 2.8: Prozentuale Abweichungen der berechneten Werte für die Energien ($t > 5 \cdot 10^{-4}$ s) von den analytischen Werten für den stationären Fall. Die punktierten Linien kennzeichnen die 95 %-Konfidenzintervalle.

In Abbildung 2.8 werden die prozentualen Abweichungen

$$\Delta E_i = 100 \cdot \frac{E_i(t) - E_i^s}{E_i^s} \quad (2.72)$$

der berechneten Energien vom analytischen Wert und die 95 %-Konfidenzintervalle (2.50) dargestellt. Auch diese Abbildungen zeigen, daß die Resultate der Simulation mit 10000 Teilchen eine Genauigkeit von etwa ± 3 % aufweisen.

2.4 Die numerische Methode II: Teilchenumwandlungsprozesse im Algorithmus

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, wie eine Fokker-Planck-Gleichung numerisch, mit Hilfe einer Monte-Carlo-Konstruktion diffusiver stochastischer Prozesse, gelöst werden kann. Eine Anwendung des vorgestellten Verfahrens auf die driftkinetischen Gleichungen (1.61) für Verunreinigungsionen ist aber nur in Fällen möglich, in denen man es mit lediglich einer Sorte von Teilchen zu tun hat, d. h., daß Teilchenumwandlungen (z. B. Änderung des Ladungszustandes durch Ionisation) keine Rolle spielen. Andernfalls verteilt sich die Gesamtheit der Verunreinigungsteilchen auf unterschiedliche Gruppen, die ein jeweils anderes Transportverhalten zeigen und zudem durch Übergänge von Teilchen von einer in eine andere Gruppe miteinander in Wechselwirkung stehen. Außerdem können die Teilchenquellen und -senken in (1.61) durch oben beschriebenes Verfahren nicht berücksichtigt werden.

Teilchenumwandlungsprozesse wie Ionisation sind typische Sprungprozesse, bei denen ein Teilchen schlagartig seine Charakteristik ändert. Wie bereits in Abschnitt 2.1 und 2.3 angesprochen, werden derartige Vorgänge durch eine Master-Gleichung beschrieben. Hier soll gezeigt werden, wie sich Gleichungen vom Typ (1.61) ergeben, die eine Kombination von Fokker-Planck- und Master-Gleichungen darstellen, wenn der Konfigurationsraum für die Einteilchenzustände geeignet erweitert wird (unter Auslassung der Quellen und Senken, sie werden in Abschnitt 2.5 behandelt).

Erneut bezeichne $\mathbf{y}$ einen Punkt im Konfigurationsraum, den man sich als den physikalischen Phasenraum vorstellen kann. Mit Z sei eine weitere Zustandsvariable bezeichnet (z. B. der Ladungszustand). Die Ersetzung

$$p(\mathbf{y}, t) \rightarrow p(Z, \mathbf{y}, t) \quad (2.73)$$

in unseren Betrachtungen bedeutet im physikalischen Bild, daß man sich nun nicht mehr nur für die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen sich zur Zeit t am Punkt $\mathbf{y}$ befindet, interessiert, sondern für die Wahrscheinlichkeit für den Einteilchenzustand $(Z, \mathbf{y})$. Auch $p(Z, \mathbf{y}, t)$ sei für alle Zeiten t auf 1 normiert

$$\sum_Z \int p(Z, \mathbf{y}, t) d\mathbf{y} = 1 \quad . \quad (2.74)$$

Die Summe geht dabei über alle möglichen diskreten Werte von Z . Die zeitliche Änderung von Z sei durch gewisse Übergangswahrscheinlichkeiten $W(Z'|Z)$ gekennzeichnet, die zeitliche Änderung von $\mathbf{y}$ wieder durch gewisse Drift- und Diffusionskoeffizienten. Die Gleichung für einen solchen stochastischen Prozeß lautet dann

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} p(Z, \mathbf{y}, t) &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} (A_i(Z, \mathbf{y}, t) p(Z, \mathbf{y}, t)) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_k} \left(\left(\mathbf{B}(Z, \mathbf{y}, t) \mathbf{B}^T(Z, \mathbf{y}, t) \right)_{ik} p(Z, \mathbf{y}, t) \right) \quad (2.75) \\
&+ \sum_{Z'} \left(W(Z'|Z) p(Z', \mathbf{y}, t) - W(Z|Z') p(Z, \mathbf{y}, t) \right) .
\end{aligned}$$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten $W(Z'|Z)$ seien Funktionen von $\mathbf{y}$ und t

$$W(Z'|Z) = t_{Z'Z}(\mathbf{y}, t) \quad . \quad (2.76)$$

Sie geben die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit an, daß ein Teilchen am Punkt $\mathbf{y}$ den Übergang $Z \rightarrow Z'$ vollzieht. Man erkennt, daß nun ein gekoppeltes Gleichungssystem für die Wahrscheinlichkeitsdichten $p(Z, \mathbf{y}, t)$, $Z = Z_1, Z_2, \dots$ gelöst werden muß.

Identifiziert man Z wieder mit dem Ladungszustand und setzt

$$\begin{aligned}
W(Z'|Z) &= S_Z^R(\mathbf{y}, t) \delta_{Z', Z-1} + S_Z^I(\mathbf{y}, t) \delta_{Z', Z+1} \\
p(Z, \mathbf{y}, t) &= \bar{f}_Z(\mathbf{y}, t) \quad ,
\end{aligned} \quad (2.77)$$

so ergeben sich die Ionisations- und Rekombinationsterme aus der Gleichung (1.61). Prozesse ähnlicher Natur lassen sich in analoger Weise einbeziehen.

Der numerische Algorithmus zur Lösung der Gleichungen (2.75) besteht zum einen wieder aus der Konstruktion der Trajektorien des Diffusionsprozesses in der Variablen $\mathbf{y}$

$$\Delta \mathbf{y} = \mathbf{A}(Z, \mathbf{y}, t) \Delta t + \mathbf{B}(Z, \mathbf{y}, t) \Delta \mathbf{W}(t) \quad , \quad (2.78)$$

hinzu kommt aber noch eine Zufallsentscheidung über eine eventuelle Änderung der Zufallsvariablen Z , die durch die Übergangswahrscheinlichkeiten $t_{Z'Z}(\mathbf{y}, t)$ bedingt wird. Für hinreichend kleine Zeitschritte Δt stellt

$$\xi = 1 - \sum_{Z'} t_{Z'Z}(\mathbf{y}, t) \Delta t \quad (2.79)$$

die Wahrscheinlichkeit² dafür dar, daß das Simulationsteilchen den Wert von Z

²Um in der praktischen Rechnung nicht mit der Bedeutung von ξ als Wahrscheinlichkeit in Konflikt zu geraten, wird üblicherweise die Formel

$$\xi = \exp\left(- \sum_{Z'} t_{Z'Z} \Delta t\right)$$

nicht ändert. Mit Hilfe einer in $[0, 1]$ gleichverteilten Zufallszahl η_1 wird entschieden, ob sich Z nach der Zeit Δt ändert

$$\begin{aligned} \eta_1 \leq \xi & : \quad \text{keine Änderung von } Z \\ \eta_1 > \xi & : \quad \text{Änderung von } Z \end{aligned} \quad (2.80)$$

Wird dabei für eine Änderung von Z entschieden, so wird eine zweite in $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallszahl η_2 herangezogen, um zu entscheiden, welchen Wert Z nach der Zeit Δt annimmt. Dazu werden kumulative Übergangswahrscheinlichkeiten C_i wie folgt definiert

$$C_i = \sum_{Z'=Z_1}^{Z_i} W(Z'|Z) / \sum_{Z'=Z_1}^{Z_n} W(Z'|Z) \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad (2.81)$$

worin $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$ die möglichen Werte von Z' ($Z' \neq Z$) bezeichnen. C_0 wird gleich Null gesetzt und C_n ist gemäß der Definition gleich 1. Gilt nun für die Zufallszahl η_2 , daß

$$C_{i-1} < \eta_2 \leq C_i, \quad (2.82)$$

so findet in der Simulation der Übergang $Z \rightarrow Z_i$ statt.

2.5 Die numerische Methode III: Simulation von Teilchenquellen und -senken

In den bisherigen Ausführungen dieses Kapitels galt das Augenmerk ausschließlich der Simulation von Prozessen, bei denen eine Einteilchenverteilungsfunktion zum Zeitpunkt $t = 0$ in Form einer Delta-Funktion gegeben ist und sich im Laufe der Zeit im Konfigurationsraum ausbreitet. Die betrachtete Situation ist somit die eines Ensembles von Teilchen, welches zu einem bestimmten Zeitpunkt in ein System eingebracht wurde und sich hiernach unter dem Einfluß diverser Effekte umverteilt. Entscheidend ist, daß die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein Teilchen in irgendeinem der möglichen Zustände im betreffenden System befindet, immer gleich 1 ist, das System also geschlossen ist. Im Modell für die Verunreinigungsionen (Gleichung (1.61)) jedoch treten Quellen und Senken für die Teilchen auf, die das Modellsystem zu einem offenen System machen. Lokalisierte Teilchensenken lassen sich noch problemlos in die oben beschriebene Simulationsmethode einbauen, indem ein zusätzlicher „Absorptionszustand“ für die Variable Z eingeführt

verwendet. Hierdurch ist gewährleistet, daß immer $0 \leq \xi \leq 1$ gilt. Für sehr kleine Δt folgt wieder der obige Ausdruck (2.79).

wird, der mit Z_A bezeichnet sei. In den Gleichungen (2.75) für die Wahrscheinlichkeitsdichten $p(Z, \mathbf{y}, t)$ tritt dann ein Term der Form

$$t_{Z_A Z}(\mathbf{y}, t) p(Z, \mathbf{y}, t) \quad (2.83)$$

hinzu. Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang aus dem Zustand mit $Z = Z_A$ soll aber gleich Null sein, d. h. $t_{ZZ_A}(\mathbf{y}, t) = 0$. Für die Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichten gilt dann

$$\sum_{Z \neq Z_A} \int p(Z, \mathbf{y}, t) d\mathbf{y} \leq 1 \quad . \quad (2.84)$$

Solch eine Vorgehensweise ist aber für lokalisierte Teilchenquellen nicht möglich, d. h. Quellen können nicht durch gewisse Übergangswahrscheinlichkeiten bei der Konstruktion von Einteilchentrajektorien berücksichtigt werden. Für jedes hinkommende Teilchen müssen jeweils eigene Pfade konstruiert werden, was bedeutet, daß das Gleichungssystem (2.75) mit jeweils unterschiedlichen Startverteilungen gelöst werden muß und die Lösungen, die sich aus den Simulationen ergeben, aufaddiert (und geeignet normiert) werden müssen. Für gewöhnlich hat dies einen immensen Rechenaufwand zur Folge, wenn man sich für die Verteilung von Verunreinigungen über einen großen Zeitraum (im Vergleich zum Simulationszeitschritt Δt) interessiert. In vielen praktisch wichtigen Fällen jedoch entstammen die Verunreinigungen zeitlich konstanten Quellen und verbleiben infolge vorhandener Teilchensenken nicht unbegrenzt im System. Hier läßt sich folgende Näherung in der Simulation anwenden: Die Simulationsteilchen werden gemäß der Quellverteilung in den Variablen $(Z, \mathbf{y})$ zur Zeit $t = 0$ ausgestreut und nach oben beschriebenem Schema über Zeitschritte Δt verfolgt, bis sie absorbiert werden (das System verlassen). Im Unterschied zu den oben erläuterten Algorithmen wird aber die Teilchenverteilung nicht zu einem bestimmten Zeitpunkt t ausgewertet, sondern für jeden Zeitschritt und man bildet die Summe

$$\sum_j p(Z, \mathbf{y}, t_j) \quad \text{wobei} \quad t_{j+1} - t_j = \Delta t \quad . \quad (2.85)$$

Durch Normierung mit der Quellstärke $\gamma = N/\Delta t$ (N Teilchen pro Zeit Δt) erhält man eine Dichteverteilung der Teilchen, die dem stationären Prozeß bei Anwesenheit einer konstanten Quelle entspricht. Geht man davon aus, daß die simulierte Verteilung der Teilchen zu jedem Zeitpunkt t_j repräsentativ ist, so ist es nicht notwendig, für jeden Zeitpunkt eine neue Simulation anzusetzen.

Kapitel 3

Numerische Anwendungen für TEXTOR – Der Code DORIS

Für die numerische Untersuchung praktisch relevanter Fragen zum Verunreinigungstransport wurde von uns der Monte-Carlo-Code DORIS entwickelt. Der Code dient dazu, für eine vorgegebene Magnetfeldkonfiguration und ein vorgegebenes Hintergrundplasma die in Kapitel 1 abgeleiteten driftkinetischen Transportgleichungen für Verunreinigungen mit der in Kapitel 2 vorgestellten Monte-Carlo-Methode zu lösen. Die Struktur des Codes ist gegenwärtig auf eine zweidimensionale räumliche Geometrie ausgerichtet (Poloidalschnitt im axisymmetrischen Tokamak-Plasma), läßt sich jedoch problemlos auf dreidimensionale Geometrien ausweiten. In dieser Arbeit werden Anwendungsbeispiele für den Tokamak TEXTOR des Forschungszentrums Jülich vorgestellt (Toroidales EXperiment zur Technisch Orientierten Forschung, Eidens und Wolf 1993). Zunächst werden in den folgenden Abschnitten einige, für die numerische Simulation wichtige physikalische Einzelheiten erläutert, die in den allgemeinen Formulierungen der Kapitel 1 und 2 offengelassen wurden. Hiernach wird eine rechnerische Kopplung an Ergebnisse des B2-EIRENE-Codes (Reiter 1992 (b)) demonstriert. Unter Verwendung von Resultaten dieses Code-Systems für unterschiedliche Randschichtplasmen in TEXTOR werden die Thermalisierung sowie Strahlungs- und Dichteprofile von Kohlenstoff-Verunreinigungen untersucht. Dabei wird auch ein rechnerischer Vergleich mit dem Modell des Codes DIVIMP angestellt. In weiteren Anwendungen werden zweidimensionale Strahlungsprofile von Kohlenstoff untersucht, wobei zur Modellierung des Hintergrundplasmas in der Randschicht zusätzlich ein einfach zu parametrisierendes eindimensionales Fluid-Modell (Tokar 1997) herangezogen wird. Die Bewertung einzelner Resultate erfolgt durch Vergleich mit qualitativ typischen Resultaten aus bolometrischen Strahlungsmessungen in TEXTOR (Rapp 1996). Den Abschluß bilden erste Anwendungen auf die Berechnung zweidimensionaler Strahlungsprofile von Neon, das in TEXTOR bereits erfolgreich zur Strahlungskühlung der Randschicht ein-

gesetzt wird (Samm 1992).

3.1 Details der praktischen Monte-Carlo-Simulation für TEXTOR

3.1.1 Das Magnetfeld und die Rechengeometrie

In einem Tokamak wird durch geeignet angebrachte Spulen eine Magnetfeldkonfiguration erzeugt, die aus einer Überlagerung eines toroidalen Magnetfeldes $\mathbf{B}_\phi$ mit einem poloidalen Magnetfeld $\mathbf{B}_\theta$ besteht, wobei letzteres zu einer helikalen Verschraubung der Magnetfeldlinien führt (siehe Abbildung 3.1). Das Poloidalfeld $\mathbf{B}_\theta$ wird durch einen Plasmastrom I_p erzeugt, der wiederum durch ein zeitlich veränderliches externes Magnetfeld induziert wird. Die resultierende Magnetfeldkonfiguration stellt sich entsprechend der Gesetzmäßigkeiten magneto-hydrodynamischer (MHD) Gleichgewichte ein (Chen 1974, Wesson 1987), wobei sich ineinander geschachtelte Flußflächen ausbilden (die im Falle von TEXTOR exzentrische kreisförmige Querschnitte besitzen). Die Verschiebung Δ der Flußflächenmittelpunkte im poloidalen Querschnitt wird Shafranov-Verschiebung genannt. Im Tokamak TEXTOR wird durch einen sogenannten Limiter, das ist ein mechanisches Hindernis, das in das Plasma hineinragt, eine letzte geschlossene Flußfläche (Separatrix) erzeugt. Außerhalb der Separatrix schneiden die Magnetfeldlinien den Limiter und es bildet sich aufgrund des dominierenden Transports entlang der Feldlinien eine nur wenige Zentimeter dicke Plasmarandschicht aus, die Abschälschicht (englisch: Scrape off Layer, SOL). Unser Modell-Feld entstammt nicht selbstkonsistenten MHD-Rechnungen, sondern stellt eine Modifikation der von Baelmans und Kadomtsev verwendeten Näherungen für toroidale Konfigurationen dar (Kadomtsev 1970, Baelmans 1994). Die von uns vorgenommene Verbesserung garantiert die exakte Divergenzfreiheit des magnetischen Feldes in der TEXTOR-Geometrie.

Die toroidale Geometrie unter Einbeziehung der Shafranov-Verschiebung wird durch folgende (nicht-orthogonale) Transformation erfaßt

$$\begin{aligned}
 x &= (r \cos\theta + R_0 + \Delta) \cos\phi & ; & \quad r = \sqrt{(\sqrt{x^2 + z^2} - R_0 - \Delta)^2 + y^2} \\
 y &= r \sin\theta & ; & \quad \theta = \arctan\left(\frac{y}{\sqrt{x^2 + z^2} - R_0 - \Delta}\right) \\
 z &= -(r \cos\theta + R_0 + \Delta) \sin\phi & ; & \quad \phi = -\arctan\left(\frac{z}{x}\right) .
 \end{aligned}
 \tag{3.1}$$

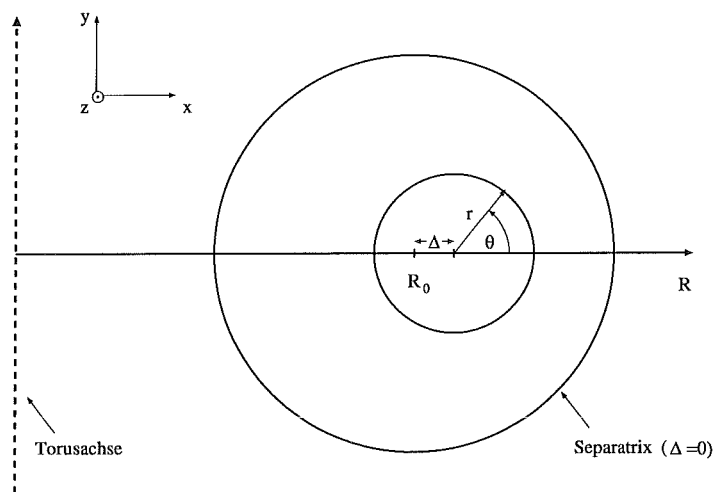
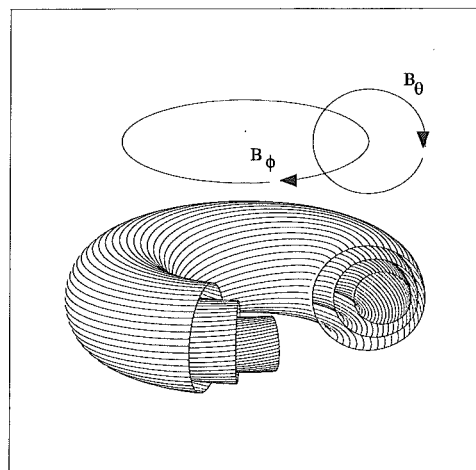


Abbildung 3.1: Oben: Schematische Darstellung der Flußflächenstruktur im Tokamak TEXTOR. Unten: Geometrische Größen im Poloidalschnitt.

ϕ ist dabei der toroidale Winkel. Die Bedeutung der anderen Größen wird aus Abbildung 3.1 ersichtlich. Für die Shafranov-Verschiebung $\Delta(r)$ verwenden wir die Näherung (Baelmans 1994)

$$\Delta(r) = -\frac{r_s^2/R_0 - R_0}{2r_s^2/R_0^2 - 4} + \sqrt{\left(\frac{r_s^2/R_0 - R_0}{2r_s^2/R_0^2 - 4}\right)^2 - \frac{r_s^2 - r^2}{2r_s^2/R_0^2 - 4}} \quad (3.2)$$

Dabei ist $\Delta(r) = 0$ an der Separatrix ($r = r_s$).

Für das Toroidal- bzw. Poloidalfeld setzen wir

$$\mathbf{B}_\phi = \frac{B_0 R_0}{R} \mathbf{e}_\phi \quad ; \quad \mathbf{B}_\theta = \frac{B_0 r}{q R_0} \frac{R_0}{(1 + \Delta' \cos\theta) R} \mathbf{e}_\theta \quad (3.3)$$

mit

$$\begin{aligned} R &= R_0 + \Delta + r \cos\theta \\ \mathbf{e}_\phi &= -\sin\phi \mathbf{e}_x - \cos\phi \mathbf{e}_z \\ \mathbf{e}_\theta &= -\sin\theta \cos\phi \mathbf{e}_x + \cos\theta \mathbf{e}_y + \sin\theta \sin\phi \mathbf{e}_z \end{aligned} \quad (3.4)$$

und

$$q = q_s \frac{r^2}{r_s^2} \left(1 - \left(1 - \frac{r^2}{r_s^2}\right)^{q_s+1}\right)^{-1} \quad ; \quad q_s = \frac{2\pi}{\mu_0} \frac{r_s^2}{R_0} \frac{B_0}{I_p} \quad (3.5)$$

B_0 bezeichnet die Stärke des toroidalen Feldes bei $R = R_0$. I_p ist der gesamte Plasmastrom in toroidaler Richtung und Δ' die Ableitung $d\Delta/dr$.

Unter Verwendung der Transformationsgleichungen (3.1) werden von uns zweidimensionale Rechengitter für die Monte-Carlo-Simulation generiert. Die Abbildung 3.2 zeigt ein Gitter, das den Außenbereich des TEXTOR-Plasmas zwischen $r = 0.3$ m und $r = 0.5$ m abdeckt ($R_0 = 1.75$ m, $r_s = 0.46$ m). Der ALT-Limiter in TEXTOR bei $\theta' = -45^\circ$ (Winkel bzgl. des geometrischen Mittelpunktes des Poloidalschnitts) wird durch ausgesparte Zellen im Rechengitter angenähert.

Die Zellen werden durch Kurven $r = \text{const.}$ (Flußflächen) und $\theta' = \text{const.}$ (bzgl. geometrischem Mittelpunkt) gebildet. Die Umrechnung zwischen θ' und dem oben definierten Winkel θ bzgl. des Flußflächenmittelpunktes erfolgt durch

$$\begin{aligned} \theta' &= \arctan\left(\frac{y}{\sqrt{x^2 + z^2} - R_0}\right) = \arctan\left(\frac{\sin\theta}{\Delta/r + \cos\theta}\right) \\ \theta &= \theta' + \arcsin\left(\frac{\Delta \sin\theta'}{r}\right) \end{aligned} \quad (3.6)$$

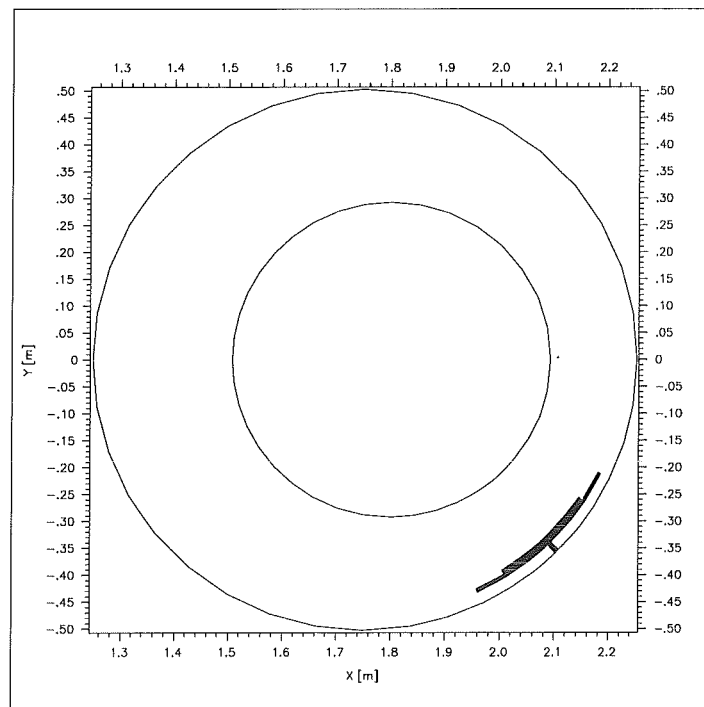
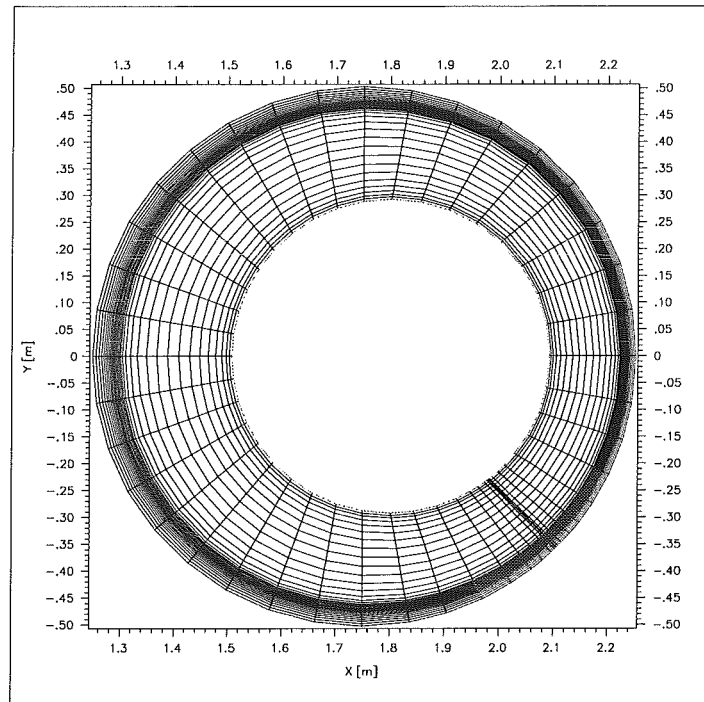


Abbildung 3.2: Beispiel eines Rechengitters für den Außenbereich des TEXTOR-Poloidalschnitts zwischen $r = 0.3\text{ m}$ und $r = 0.5\text{ m}$. Das untere Bild zeigt die ausgesparten Zellen, die den ALT-Limiter nähern.

3.1.2 Ionisations- und Rekombinationsraten für C und Ne

Ohne Rückgriff auf komplizierte Modelle verwenden wir in dieser Arbeit approximative Fit-Formeln für die Anhängigkeit der Ionisations- und Rekombinationsraten von der Elektronentemperatur (Tokar 1992). Diese Fit-Formeln nähern die Ergebnisse tiefergehender theoretischer Betrachtungen (Bell 1982), die auf Streumodellen in der Coulomb-Born-Approximation fußen, und erfassen in befriedigender Weise die Situation in optisch dünnen Plasmen, in denen die Ionisation und Rekombination vornehmlich durch Stöße mit Elektronen verursacht werden (die Dreikörper-Rekombination wird nicht erfaßt; diese Beschränkung auf Stoßionisation und Strahlungsrekombination wird in der plasmaphysikalischen Literatur als Corona-Näherung bezeichnet). Die Formel für die Ionisationskonstante C_Z^I lautet damit

$$C_Z^I = \frac{A_Z^I \sqrt{T} e^{-E_Z^I/T}}{1 + B_Z^I T} \quad (3.7)$$

Die Temperatur T wird hierin in eV gerechnet und C_Z^I ist in Einheiten von $[\text{m}^3/\text{s}]$ gegeben. Die Rekombinationskonstante C_Z^R ist gegeben durch

$$C_Z^R = 5.2 \cdot 10^{-14} \sqrt{X} \begin{cases} X e^X (-0.58 - \ln X + X - 0.25 X^2 + 0.55 X^3) & \text{für } X \leq 1 \\ \frac{X^2 + 2.33 X + 0.25}{X^2 + 3.33 X + 1.68} & \text{für } X > 1 \end{cases} \quad (3.8)$$

Die dimensionslose Größe X ist dabei E_{Z-1}^I/T und die Rekombinationskonstante C_Z^R ist in Einheiten von $[\text{m}^3/\text{s}]$ gegeben. Auch hierin wird die Temperatur in eV gerechnet.

Übergangswahrscheinlichkeiten, wie sie in den Gleichungen (1.61) und (2.77) auftauchen und für unsere numerische Monte-Carlo-Prozedur benötigt werden, ergeben sich durch Multiplikation von C_Z^I bzw. C_Z^R mit der Elektronendichte n_e

$$S_Z^I = n_e C_Z^I \quad ; \quad S_Z^R = n_e C_Z^R \quad (3.9)$$

In der Tabelle 3.1 sind die Fit-Parameter für die von uns betrachteten Verunreinigungen Kohlenstoff und Neon aufgeführt. Die halblogarithmischen Darstellungen in den Abbildungen 3.3 und 3.4 zeigen die Temperaturabhängigkeit der Ionisations- und Rekombinationskonstanten C_Z^I bzw. C_Z^R .

3.1.3 Strahlungsraten für C und Ne

Auch die Strahlungsraten für die von uns betrachteten Verunreinigungen Kohlenstoff und Neon werden in dieser Arbeit durch Fit-Formeln beschrieben, die

Spezies	$A_Z^I [10^{-14} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1} \text{ eV}^{-1/2}]$	$B_Z^I [10^{-3} \text{ eV}^{-1}]$	$E_Z^I [\text{eV}]$
C ⁰	26.800	10.000	11.3
C ¹⁺	5.900	6.300	24.4
C ²⁺	1.340	4.100	48.0
C ³⁺	0.274	1.730	64.5
C ⁴⁺	0.020	0.372	392.0
C ⁵⁺	0.006	0.410	490.0
Ne ⁰	5.100	2.300	21.6
Ne ¹⁺	2.720	1.810	41.1
Ne ²⁺	1.450	1.150	63.5
Ne ³⁺	0.766	1.450	92.5
Ne ⁴⁺	0.326	1.450	126.2
Ne ⁵⁺	0.190	1.260	157.9
Ne ⁶⁺	0.069	0.890	207.5
Ne ⁷⁺	0.024	0.460	239.1
Ne ⁸⁺	0.002	0.160	1196.0
Ne ⁹⁺	0.001	0.175	1360.0

Tabelle 3.1: Fit-Parameter für die Formeln (3.7) und (3.8) zur Berechnung der Ionisations- und Rekombinationsraten C_Z^I bzw. C_Z^R .

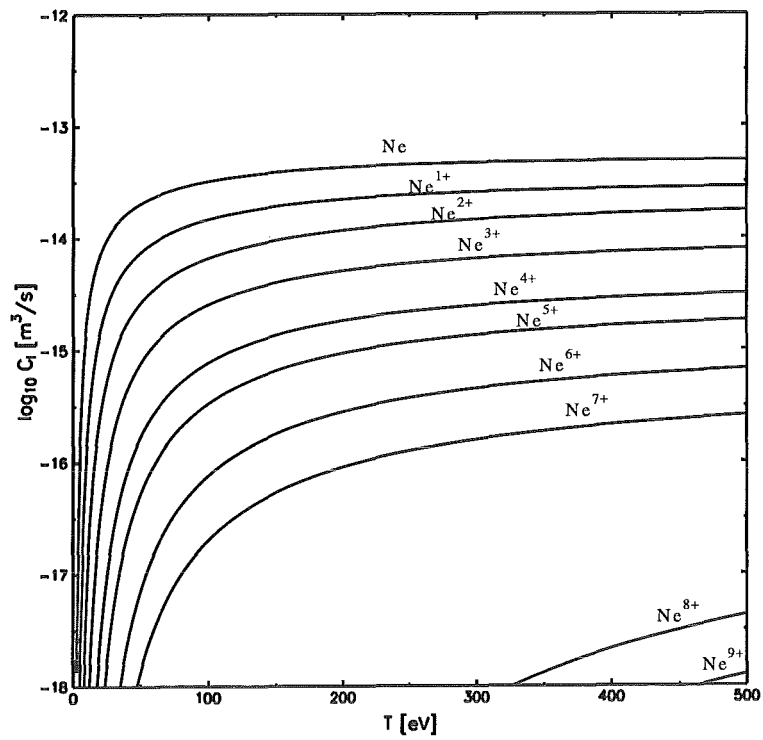
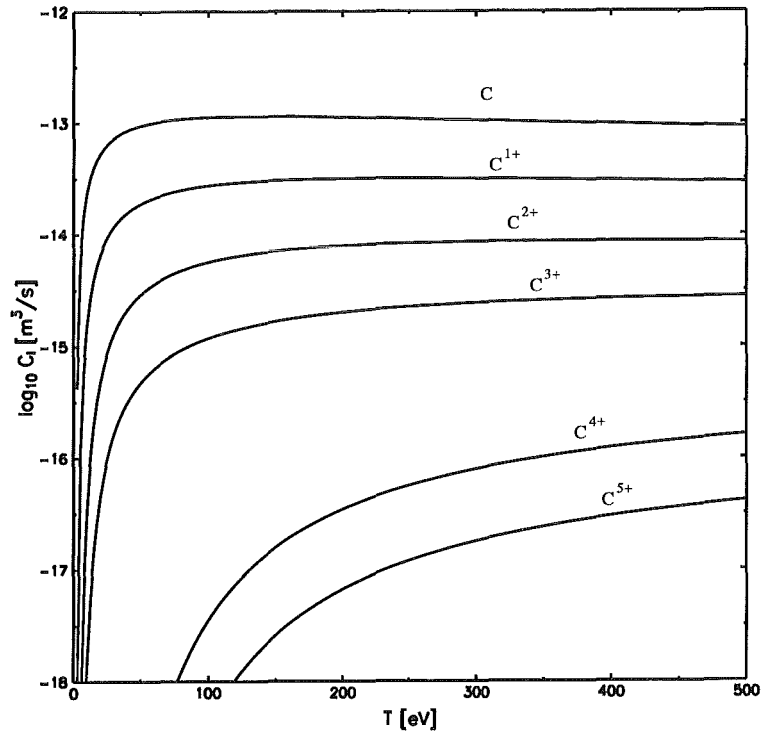


Abbildung 3.3: Abhängigkeit der Ionisationskonstanten C_Z^I von der Elektronentemperatur für die verschiedenen Ladungsstufen von C und Ne.

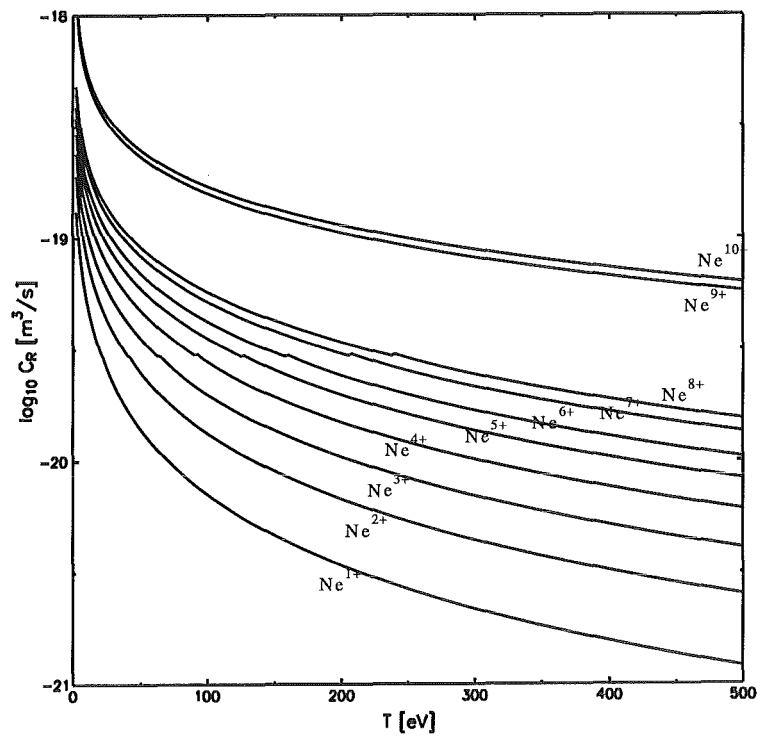
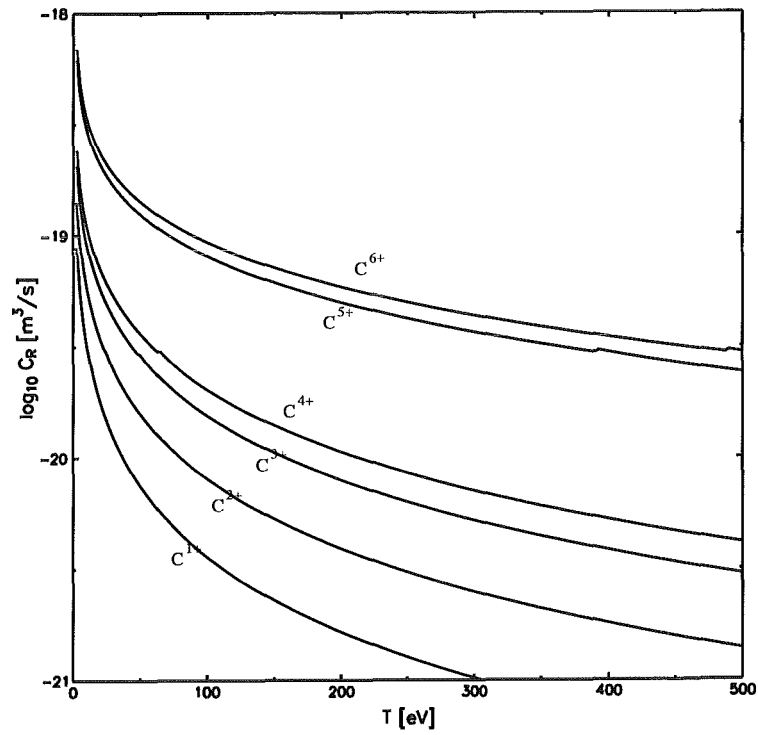


Abbildung 3.4: Abhängigkeit der Rekombinationskonstanten C_Z^R von der Elektronentemperatur für die verschiedenen Ladungsstufen von C und Ne.

die Abhängigkeit von der Elektronentemperatur wiedergeben wie sie aus aufwendigeren theoretischen Modellen folgen (Tokar 1992, Bell 1982). Hierbei ist die Gültigkeit ebenfalls auf optisch dünne Plasmen beschränkt, in denen die Abregung infolge von Stößen mit Elektronen dominiert. Die Strahlungsrate R_Z wird beschrieben durch (Temperatur in eV)

$$R_Z = \frac{A_Z^R \sqrt{T} e^{-E_Z^R/T}}{1 + B_Z^R \sqrt{T} + D_Z^R T} + F^R Z^2 \sqrt{T} \quad . \quad (3.10)$$

Der Anteil proportional zu Z^2 beschreibt dabei die Bremsstrahlung, die aufgrund der Ablenkung von Elektronen im Feld des Ionenkerns auftritt ($F^R = 1.44 \cdot 10^{19}$, $1.73 \cdot 10^{19} \text{ eV}^{1/2} \text{ m}^3$ für C bzw. Ne). Durch Multiplikation mit der Elektronendichte n_e und der Dichte n_Z der jeweiligen Ionenspezies ergibt sich die Strahlungsleistungsdichte W (in $\text{eV m}^{-3}/\text{s}$)

$$W = n_e n_Z R_Z \quad . \quad (3.11)$$

In Tabelle 3.2 sind die Fit-Parameter für C und Ne aufgeführt. Abbildung 3.5 zeigt die Temperaturabhängigkeit der Strahlungsraten für diese Elemente.

3.1.4 Physikalische Zerstäubung des Kohlenstofflimiters

Eine wesentliche Quelle für Kohlenstoff-Verunreinigungen (und auch für „recyclierende“ Elemente wie Neon) im TEXTOR-Plasma ist der ALT-Limiter, der aus Graphit besteht und in direktem Kontakt mit dem Plasma steht. Die hochenergetischen Ionen des Plasmas können beim Stoß mit den Gitteratomen des Limiters soviel Energie übertragen, daß die Gitteratome ihre Plätze verlassen und weitere Gitteratome durch Stöße aus dem Gitterverband lösen können, falls der Energieübertrag ausreicht, um das Oberflächenpotential (Sublimationsenergie) zu überwinden. Die Zerstäubungsausbeute Y ist definiert als die Zahl der emittierten Atome pro einfallendes Teilchen. Zur Berechnung der Zerstäubungsrate Y benutzen wir in dieser Arbeit die semi-empirische Bohdansky-Formel (Eckstein 1993)

$$Y(E, \alpha = 0) = Q s_n^{KrC}(\varepsilon) \left(1 - \left(\frac{E_{th}}{E} \right)^{2/3} \right) \left(1 - \frac{E_{th}}{E} \right)^2 \quad . \quad (3.12)$$

Hierin ist E die Energie der auftreffenden Ionen und α der Auftreffwinkel. Eine Variation der Zerstäubungsrate Y mit dem Winkel α wird vorläufig nicht betrachtet, obgleich das analytische Modell auch dies erfaßt und zum Teil signifikant höhere Zerstäubungsausbeuten für $\alpha \neq 0$ vorhersagt. Dies begründen wir mit Unsicherheiten bei der Festlegung des Auftreffwinkels, die einer detaillierten, gesonderten Betrachtung bedarf (Knauf 1997).

Es sind ε die reduzierte Energie

Spezies	$A_Z^R [10^{-13} \text{ eV}^{1/2} \text{ m}^3]$	$B_Z^R [\text{eV}^{-1/2}]$	$D_Z^R [10^{-3} \text{ eV}^{-1}]$	$E_Z^R [\text{eV}]$
C ¹⁺	5.600	0.213	14.3	7.76
C ²⁺	7.270	0.265	23.0	7.59
C ³⁺	7.540	0.483	56.5	5.48
C ⁴⁺	0.223	0.000	3.4	257.50
C ⁵⁺	0.046	0.000	0.6	250.00
Ne ¹⁺	0.000	0.000	0.0	0.00
Ne ²⁺	0.000	0.000	0.0	0.00
Ne ³⁺	0.970	0.000	25.0	6.23
Ne ⁴⁺	1.490	0.000	28.2	7.94
Ne ⁵⁺	1.320	0.000	9.5	7.61
Ne ⁶⁺	2.520	0.000	14.3	9.70
Ne ⁷⁺	0.970	0.200	13.4	4.13
Ne ⁸⁺	0.042	0.000	0.4	711.00
Ne ⁹⁺	0.016	0.000	0.3	795.00

Tabelle 3.2: Fit-Parameter für die Formel (3.10) zur Berechnung der Strahlungsrate R_Z .

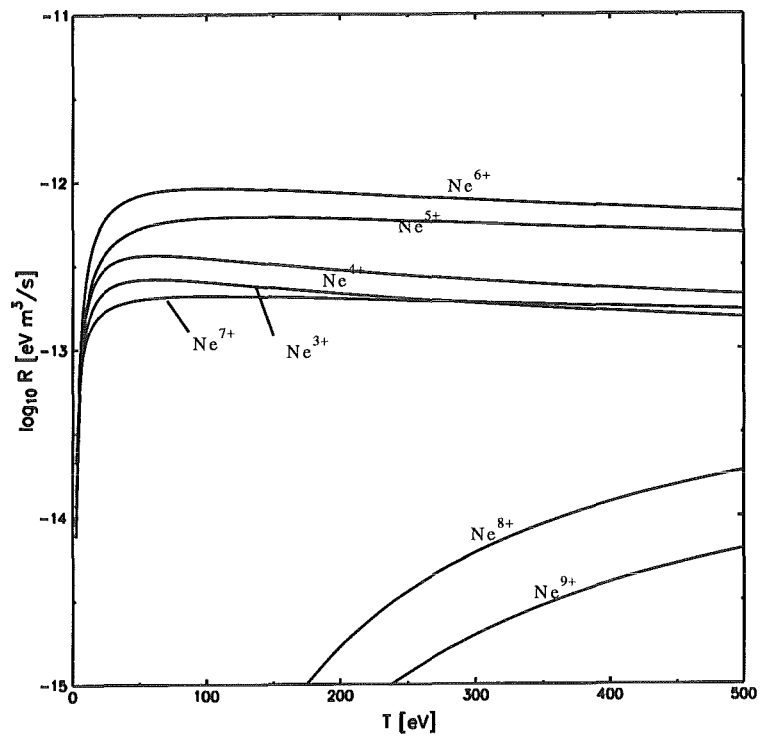
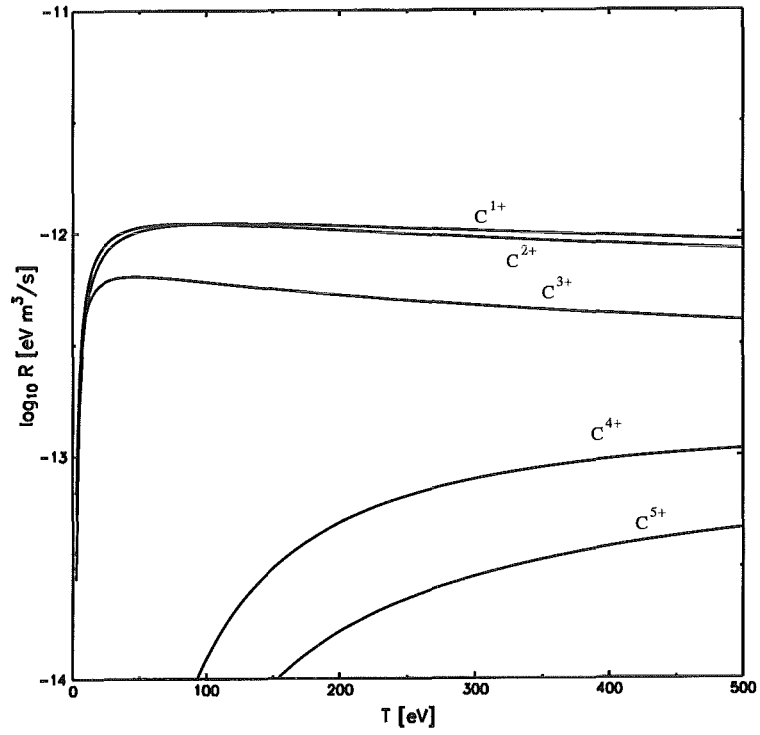


Abbildung 3.5: Abhängigkeit der Strahlungsraten R_Z von der Elektronentemperatur für die verschiedenen Ladungsstufen von C und Ne.

$$\varepsilon = E \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{a_L}{Z_1 Z_2 e^2} = \frac{E}{E_{TF}} \quad (3.13)$$

und s_n^{KrC} der nukleare Bremsquerschnitt

$$s_n^{KrC}(\varepsilon) = \frac{0.5 \ln(1 + 1.2288 \varepsilon)}{\varepsilon + 0.1728 \sqrt{\varepsilon} + 0.008 \varepsilon^{0.1504}} \quad , \quad (3.14)$$

mit den Massen m_1 und m_2 und den Ladungen Z_1 und Z_2 des Projektil- bzw. des Targetatoms. E_{TF} ist das Thomas-Fermi-Potential. Schließlich ist a_L die Lindhard-Abschirmlänge

$$a_L = 0.4685 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \text{ \AA} \quad (3.15)$$

und Q und E_{th} sind Fit-Parameter zur Anpassung an experimentelle Daten. (Die Schwellen-Energie E_{th} ist die Mindestenergie, die das auftreffende Projektilatom besitzen muß, um ein Atom aus dem Gitterverband zu lösen.)

In Tabelle 3.3 sind die Parameter für die Projektil-Target-Kombinationen Deuterium-Kohlenstoff und Kohlenstoff-Kohlenstoff aufgeführt. Abbildung 3.6 zeigt die Abhängigkeit der Zerstäubungsrate Y von der Projektilenergie für diese Kombinationen.

Die Geschwindigkeits- und Winkelverteilung der abgestäubten Atome kann durch eine Kombination aus Kosinusverteilung und Thompson-Verteilung (Thompson 1969) beschrieben werden

$$f(v, \theta) dv d\cos\theta = \frac{8}{\pi} \frac{(v/v_s)^2}{(1 + (v/v_s)^2)^3} \cos\theta dv/v_s d\cos\theta \quad . \quad (3.16)$$

Darin ist θ der Winkel bzgl. der Oberflächennormalen und $v_s = \sqrt{2 U_s / m_2}$ mit der Oberflächenenergie U_s . In der praktischen Simulation muß eine Abschneideenergie eingeführt werden, da die Thompson-Verteilung bei einer Integration über v von 0 bis ∞ zwar endliche Mittelwerte für die Geschwindigkeit und die kinetische Energie liefert, der Mittelwert des Energieflusses ($\sim v^3$) jedoch divergiert. Wir wählen für die Abschneideenergie in unseren Rechnungen die maximale Energie E_{max} , die von den Projektilatomen auf die Targetatome bei einem zentralen Stoß übertragen werden kann, d. h.

$$E_{max} = \frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E \quad . \quad (3.17)$$

Projektil-Target	Q	E_{th} [eV]	E_{TF} [eV]
D-C	0.08	27.64	447.0
C-C	0.75	52.98	5688.0

Tabelle 3.3: Parameter für die Bohdansky-Formel (3.12) zur Berechnung der Zerstäubungsrate Y .

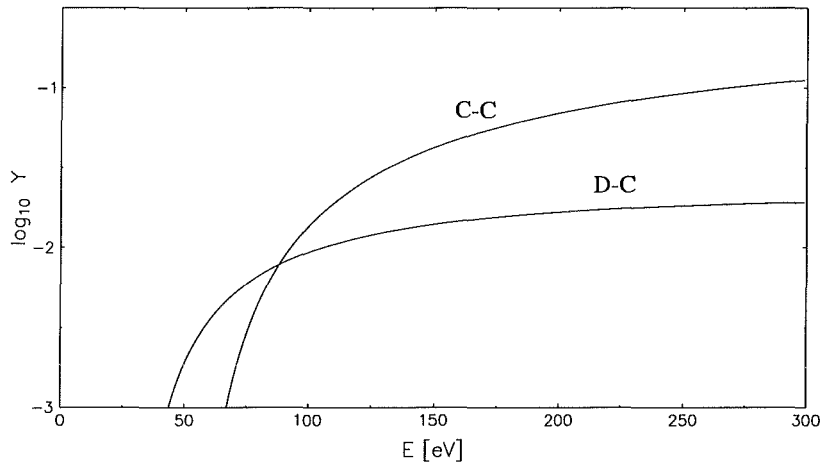


Abbildung 3.6: Abhängigkeit der Zerstäubungsrate Y von der Energie der Projektilatome für die Projektil-Target-Kombinationen D-C und C-C.

3.2 Übersicht und Details zu den Simulationsrechnungen

Wie eingangs erwähnt, untersuchen wir das Transportverhalten von Kohlenstoff und Neon für verschiedene Szenarien von Randschichtplasmen in TEXTOR, wobei wir zum einen Resultate des B2-EIRENE-Codes heranziehen, und zum anderen Hauptplasma-Parameter mit Hilfe eines auf zwei Dimensionen extrapolierten eindimensionalen Modells (siehe Anhang D) bestimmen. Insgesamt wurden dreizehn Simulationsrechnungen unter Verwendung von sechs unterschiedlichen Modell-Plasmen durchgeführt. Die sechs Modell-Plasmen seien mit dg1, dg2, dg3, K-OH, OH-1 und OH-2 bezeichnet:

- Die Resultate dg1, dg2 und dg3 entstammen Modellierungen, die von Gray (Gray 1996) mit Hilfe des B2-EIRENE-Codes durchgeführt wurden. Sie geben drei ohmsch geheizte Schüße unterschiedlicher Dichte $\bar{n}$ (liniengemittelte Dichte entlang der Äquatorialebene von TEXTOR) wieder. Details zur B2-EIRENE-Modellierung finden sich bei Gray (Gray 1996, Abschnitt 4.1).
- Die Hintergrundplasma-Parameter K-OH wurden von Keijers (Keijers 1996), ebenfalls unter Verwendung des B2-EIRENE-Codes, modelliert. Auch sie repräsentieren einen ohmschen Schuß in TEXTOR.
- Die Hauptplasma-Profile OH-1 und OH-2 wurden mit dem in Anhang D beschriebenen Modell ermittelt, wobei die erforderlichen Eckdaten (siehe Abschnitt 3.4) so gewählt wurden, daß sie in etwa B2-EIRENE-Resultaten für ohmsch geheizte Plasmen in TEXTOR entsprechen.

Die jeweiligen Rechnungen wurden mit unterschiedlichen Zielsetzungen vorgenommen und differieren in der Wahl einzelner Basisparameter und in der Berücksichtigung bzw. Auslassung verschiedener Effekte in der Simulation des Verunreinigungstransports (eine Übersicht über die Größenordnung der Transport-Effekte ist in Anhang G zu finden). Die Tabelle 3.4 verschafft einen Überblick über die grundlegenden Unterschiede der Simulationsrechnungen, deren Resultate in den nachfolgenden Abschnitten vorgestellt und diskutiert werden.

Im ersten Block der Tabelle 3.4 werden die betrachteten Verunreinigungsspezies, der Satz der verwendeten Plasma-Parameter und Angaben zur Geometrie des Rechenbietes aufgeführt. Das Rechengebiet definiert durch einen minimalen und einen maximalen Flußflächenradius (r_{min} bzw. r_{max}), sowie durch den Radius der Separatrix r_s .

Im zweiten Block sind die Effekte aufgeführt, die den Transport im Ortsraum verursachen. Gemäß der Diskussion in Anhang G läßt sich grob folgende globale

Einteilung (lokal können die Verhältnisse durchaus anders sein) für TEXTOR-Randschicht-Fälle vornehmen:

Parallel-Drift	: Dominanter Effekt
$\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift	: Dominanter Effekt
∇B -Drift	: Kleiner Effekt $\sim 1/Z$
Krümmungsdrift	: Mittlerer Effekt $\sim 1/Z$
Anomaler Transport	: Mittlerer Effekt

Die Berücksichtigung eines dieser Effekte ist in der Tabelle durch ein „ $\times$ “ gekennzeichnet, die Vernachlässigung durch ein „o“.

Im dritten Block sind die Effekte aufgeführt, die einen Transport im Geschwindigkeitsraum verursachen. Sie sind nach Anhang G alle von gleicher Größenordnung und unterscheiden sich nur in ihrer eventuellen Proportionalität zu Z bzw. Z^2 .

Eine Vernachlässigung der Parallel-Drift, des anomalen Transports und des Spiegeleffekts (der im wesentlichen die toroidale Geometrie in die Simulation einführt) wurden von uns in allen Simulationen miteinbezogen. Auch die ∇B -Drift und die Krümmungsdrift, die sich als größenordnungsmäßig sekundäre Effekte erwiesen, wurden von uns in allen Rechnungen berücksichtigt. Ebenso beließen wir durchweg eine „minimale“ Coulomb-Streuung an maxwell-verteilten Hintergrundionen in der Simulation¹. Zur Untersuchung von Einzeleffekten – insbesondere der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und der Thermokraft – wurden aber in einzelnen Rechnungen das elektrische Feld und/oder die Coulomb-Streuung an den Inhomogenitäten des Hintergrundplasmas ausgelassen. Weiterhin betrachteten wir in einer Rechnung zu Vergleichszwecken den Effekt der approximativen Thermokraft, die im Abschnitt 1.5.1 diskutiert wurde.

Zu den Rechnungen waren weiterhin die folgenden Details von Bedeutung:

- Als Quelle für die Verunreinigungen wurde ausschließlich der ALT-Limiter

¹Die Vernachlässigung der Coulomb-Streuung an den Elektronen des Hauptplasmas begründet sich wie folgt: Betrachtet man die Ausdrücke (1.52) für die Drift- und Diffusionskoeffizienten des Coulomb-Stoßterms, so zeigt sich, daß die Proportionalität der Koeffizienten $K_{\parallel}$ und $K_{\perp}$ vom – im Falle von Elektronen als Hintergrundspezies – großen Vorfaktor $(1 + m/m_e)$ nur eine vermeintliche ist, da die ersten Ableitungen der Potentialfunktionen ϕ und ψ proportional zu m_e sind. Für den Fall von Elektronen ergibt sich überdies, daß die normierte Relativgeschwindigkeit χ von nur kleinem Betrag ist, da die thermische Geschwindigkeit der Elektronen weit größer ist als die Differenz der Geschwindigkeit niederenergetischer Verunreinigungen und der Elektronen-Stömungsgeschwindigkeit. Da also $\chi \ll 1$ gilt, folgt, daß im Falle von Elektronen als Hintergrundteilchen $K_{\parallel}, K_{\perp} \approx 0$ ist. Die Diffusionskoeffizienten hingegen sind zwar nicht Null für $\chi \ll 1$, doch sind sie proportional zu $\sqrt{m_e}$ und somit um eine Größenordnung kleiner als die Diffusionskoeffizienten für die Coulomb-Streuung an den Hintergrundionen. Es ist aber zu bemerken, daß sich die Situation ändert, wenn hochenergetische Verunreinigungen betrachtet werden, wie z. B. Heliumkerne, die bei Kernverschmelzungen entstehen. Dabei wäre die Coulomb-Streuung an den Elektronen viel stärker als die an den Hintergrundionen, weshalb die Modellierung anders gestaltet werden müsste.

angenommen, wobei die Quellstärke γ_s der neutralen C^0 -Teilchen über den Deuteronenfluß, der auf die Limiterkanten auftrifft, ermittelt wurde:

$$\gamma_s = \int n Y c_s dA \quad (3.18)$$

worin n die Dichte der Deuteronen bezeichnet, c_s die Schallgeschwindigkeit ($c_s = \sqrt{\frac{T_e + T_i}{m}}$, m = Deuteronenmasse), Y die Zerstäubungsrate, die wir mit Hilfe der Bodhansky-Formel (3.12) ermittelten, und dA ein Flächenelement der Limiteroberfläche.

- Die neutralen Kohlenstoffteilchen verließen den Limiter in unserer Simulation gemäß der Thompson-Kosinus-Verteilung (3.16), wobei wir aber die Vorzugsrichtung um 60° in das Plasma hineindrehten, um die spezifische Form des ALT-Limiters realistischer anzunähern als es die Zellen des Rechengitters tun. Für die Energie E der zerstäubenden Deuteronen verwendeten wir in der Bohdansky- und der Thompson-Formel näherungsweise den Ausdruck $E = 2 T_i + 3.5 T_e$. Diese Formel erfaßt näherungsweise die Beschleunigung, die die Deuteronen im elektrischen Potential der Vorschicht und in der Debye-Schicht erfahren.
- Es wurde keine Selbstzerstäubung betrachtet. Tests zeigten, daß sie in den hier vorgestellten Fällen keine bedeutende Rolle spielt.
- Die äußeren Wände des Rechengebietes nahmen wir als absorbierend an, für die inneren, dem Plasmakern zugewandten, nahmen wir für die Verunreinigungen eine Totalreflexion an (dies entspricht der Annahme eines verschwindenden Dichtegradienten für die Verunreinigungen an diesem Rand).
- Wie bereits bemerkt, vernachlässigten wir die Coulomb-Streuung der Verunreinigungen an den Elektronen.

Abschließend soll an dieser Stelle noch die dreidimensionale Darstellung erläutert werden, die wir für die verschiedenen Sätze der Plasma-Parameter und die Ergebnisse des Abschnitts 3.3.1 benutzen. Wir wählten eine Darstellung über einem rechtwinkligen r - α -Gitter, das den Zellen unseres Rechengitters entspricht. Abbildung 3.7 zeigt die Bedeutung der Koordinaten. α wird bezogen auf den geometrischen Mittelpunkt des Poloidalschnitts und von der Limitermitte aus gezählt. r ist der Flußflächenradius. In dem dargestellten rechtwinkligen Gitter befindet sich also unten der Plasmarand, oben die Grenze zum Plasmakern und unten rechts und links jeweils eine Hälfte des Limiters.

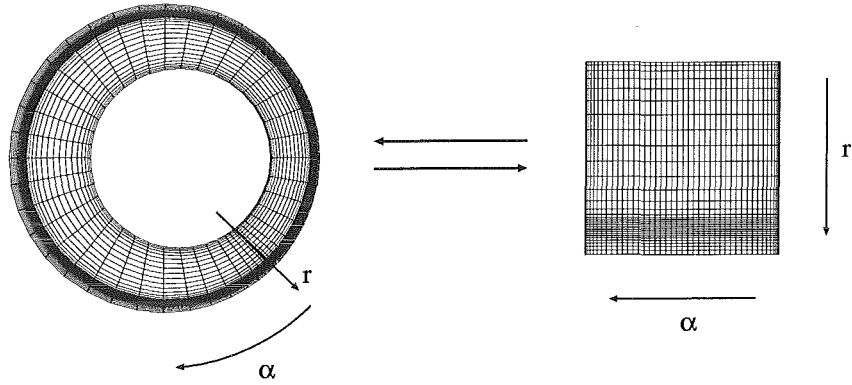


Abbildung 3.7: Zusammenhang zwischen dem rechtwinkligen Gitter für die dreidimensionalen Darstellungen und dem Rechengitter.

Abschnitt	3.3.1			3.3.2				3.3.3		3.4.1		3.4.2	
Verunreinigungs-spezies	C^0-C^{3+}			C^0-C^{6+}				C^0-C^{6+}		C^0-C^{6+}		Ne^0-Ne^{10+}	
Plasma-Parameter	dg1	dg2	dg3	K-OH				K-OH		OH-1	OH-2	OH-1	OH-2
$r_{min}-r_{max} / [m]$	0.4 – 0.5			0.3 – 0.5				0.3 – 0.5		0.3 – 0.5		0.3 – 0.5	
$r_s / [m]$	0.45			0.46				0.46		0.46		0.46	
Parallel-Drift	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
$\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift	o	o	o	×	o	o	o	o	o	×	o	×	o
∇B -Drift	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
Krümmungsdrift	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
Anomaler Transport	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
$D_{\perp} / [m^2/s]$	0.5			1.0				1.0		1.0		1.0	
$E_{\parallel}$ -Feld	o	o	o	×	×	×	o	×	×	×	×	×	×
Spiegel-Effekt	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
Coulomb-Streuung an Maxwell-Hintergrund	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×
Coulomb-Streuung an Inhomogenitäten	o	o	o	×	×	o	o	×	o	×	×	×	×
Approximative Thermo-Kraft	o	o	o	o	o	o	o	o	×	o	o	o	o

Tabelle 3.4: Parameter und einbezogene Transporteffekte der TEXTOR-Rechnungen der Abschnitte 3.3.1, 3.3.2, 3.3.3, 3.4.1 und 3.4.2.

3.3 Kopplung an den B2-EIRENE-Code

Das Code-System B2-EIRENE (Reiter 1992 (b)) wurde in den vorangegangenen Abschnitten bereits mehrfach erwähnt. Dieses Werkzeug zur zweidimensionalen Modellierung von Plasmen in toroidalen Magnetfeldkonfigurationen läßt die Berechnung der Parameter des kompletten Plasmas zu, soll jedoch von uns dazu genutzt werden, die Parameter des Hauptplasmas zu bestimmen, um mit diesen Informationen den Transport von Verunreinigungen zu untersuchen. Diese Aufteilung der Modellierung findet aus den oben ausführlich dargelegten Gründen für die Notwendigkeit einer kinetischen Modellierung des Verunreinigungstransports statt (eine Modellierung der Verunreinigungen auf der Basis von Fluidmodellen ist auch mit dem B2-EIRENE-Code möglich). Für die Zukunft ist auch eine Rückkopplung unseres Codes DORIS an den B2-EIRENE-Code geplant, bei der die Resultate aus der Monte-Carlo-Simulation der Verunreinigungen als zusätzliche Quellen und Senken für Teilchen-, Impuls- und Energiebilanz an den B2-EIRENE-Code zurückgegeben werden. Ein darauf folgender B2-EIRENE-Lauf liefert dann ein modifiziertes Hintergrundplasma für den Code DORIS, und durch weiteren Datenaustausch zwischen den Codes wird eine iterative Lösung für das Gesamtplasma angestrebt. Diese Kopplung befindet sich derzeit noch in der Entwicklung. Bisher ist nur eine Richtung dieser Prozedur realisiert worden, nämlich die Verwendung von B2-EIRENE-Resultaten für unsere Rechnungen mit DORIS, wobei aber auch hierbei noch nicht die gesamte mögliche Information übermittelt wird. So werden momentan noch nicht die elektrischen Felder und Gradienten für Temperatur, Dichte etc. übergeben (obgleich diese Informationen implizit im B2-EIRENE-Code enthalten sind). Wir beschränken uns deshalb in unseren Anwendungsbeispielen entweder auf eine reduzierte Betrachtung des Verunreinigungstransports auf B2-EIRENE-Hintergrundplasmen, oder versuchen fehlende Information durch Interpolation zu ermitteln.

3.3.1 Thermalisierung von Limiter-Kohlenstoff

In diesem Abschnitt wollen wir die Aufheizung von Kohlenstoffverunreinigungen untersuchen, die durch Zerstäubung des ALT-Limiters in TEXTOR in das Plasma gelangen. Wir betrachten hierzu die drei TEXTOR-Szenarien dg1, dg2 und dg3, die mit dem B2-EIRENE-Code von Gray (Gray 1996) modelliert wurden. Die berechneten Plasma-Parameter geben drei unterschiedliche, ohmsch geheizte Schüsse wieder, wobei dg1 einen Schuß mit niedriger Dichte (liniengemittelte Dichte entlang der Äquatorialebene $\bar{n} = 1.8 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$), dg2 einen Schuß mittlerer Dichte ($\bar{n} = 2.6 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$) und dg3 einen Schuß mit hoher Dichte ($\bar{n} = 4.0 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$) darstellt. Die Separatrix befand sich beim Experiment und in der Modellierung beim Radius $r = 0.45 \text{ m}$. Das Rechengitter überdeckt den Bereich von $r = 0.4 \text{ m}$ bis $r = 0.5 \text{ m}$. Weitere Details der B2-EIRENE-Modellierung

finden sich bei Gray (Gray 1996, Abschnitt 4.1). Die Parameter n , T_e , T_i und $V_{||}$, d. h. die Dichte, die Elektronen- und Ionentemperatur und die Stömungsgeschwindigkeit der Ionen entlang des Magnetfeldes, sind in den Abbildungen 3.8 und 3.9 dargestellt. Es ist erkennbar, daß im Fall dg1 eine höhere Ionentemperatur und eine höhere Strömungsgeschwindigkeit in der Abschälschicht als in den Fällen dg2 und dg3 vorherrscht. Für dg2 und dg3 sind diese Parameter in der Abschälschicht annähernd gleich. Die Elektronentemperatur in der Abschälschicht ist am größten für dg1 und am kleinsten für dg3. In der Simulation betrachteten wir ausschließlich die Verunreinigungsionen C^0 bis C^{3+} , wobei die Wirkung elektrischer und der Coulomb-Streuung an Inhomogenitäten im Hintergrundplasma nicht berücksichtigten. Das Augenmerk galt hauptsächlich der Coulomb-Streuung am ungestörten Maxwell-Anteil der Hintergrundionen. Die Beschränkung auf die Spezies C^0 bis C^{3+} fand aus rechenzeittechnischen Gründen statt und läßt sich rechtfertigen durch die annähernd fehlende Rekombination von C^{4+} nach C^{3+} in diesem Temperaturbereich, die die Verteilung der niedrigen Ladungsstufen von den höheren abkoppelt. Für den anomalen Diffusionskoeffizienten wählten wir einen konstanten Wert von $D_{\perp} = 1.0 \text{ m}^2/\text{s}$. Ansonsten wurde die Monte-Carlo-Simulation durchgeführt wie in Kapitel 2 und Anhang E beschrieben. Die Quellstärken für die C^0 -Teilchen betrugen (in Teilchenzahl pro Sekunde): dg1: $0.53 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$, dg2: $0.65 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$, dg3: $0.54 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$, ist also in allen drei Fällen annähernd gleich

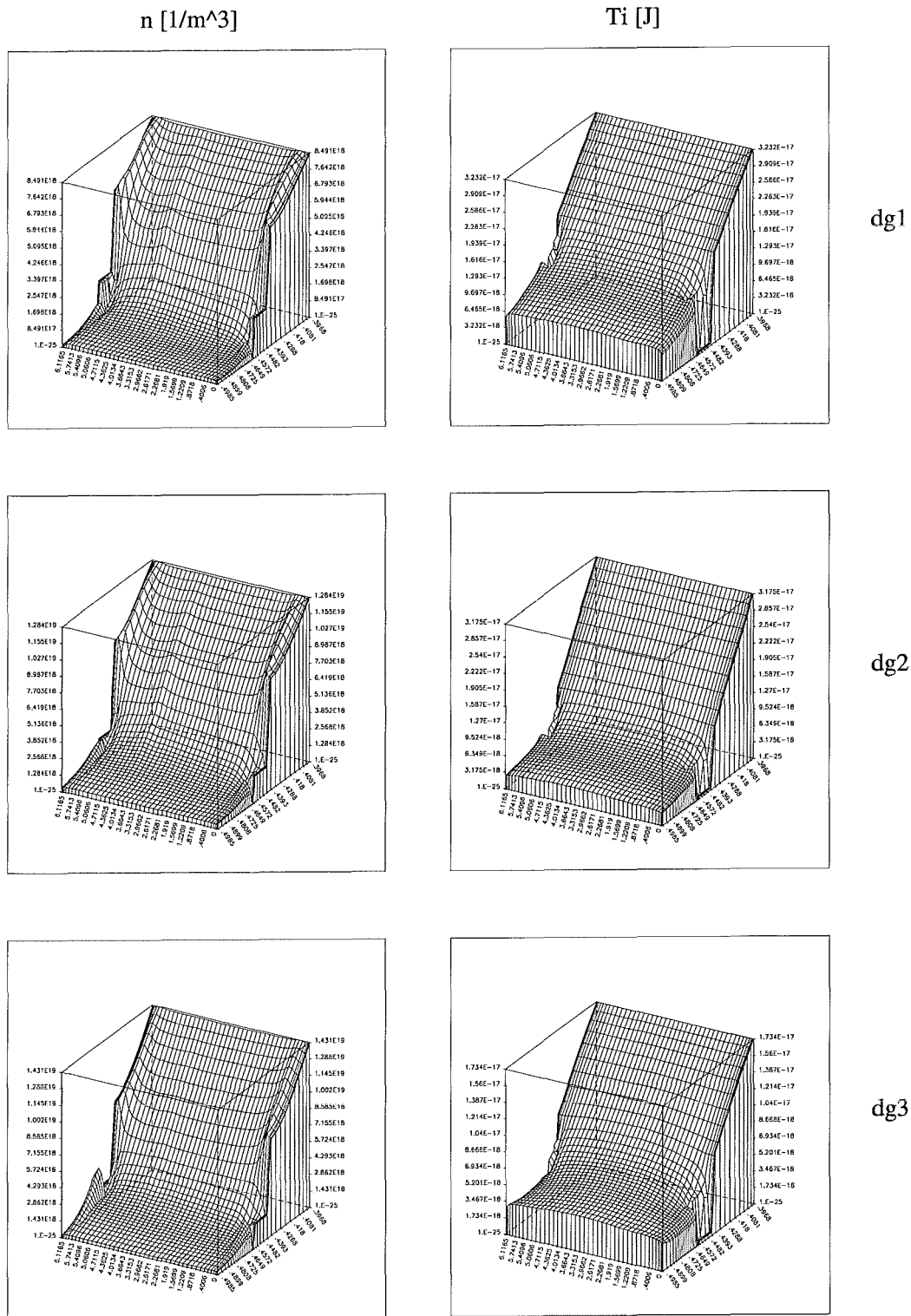


Abbildung 3.8: Parameter des Hintergrundplasmas aus der B2-EIRENE-Modellierung für die drei ohmsch geheizten Schüsse dg1 (oben), dg2 (mitte) und dg3 (unten). Links: Ionen- bzw. Elektronendichte n . Rechts: Ionentemperatur T_i .

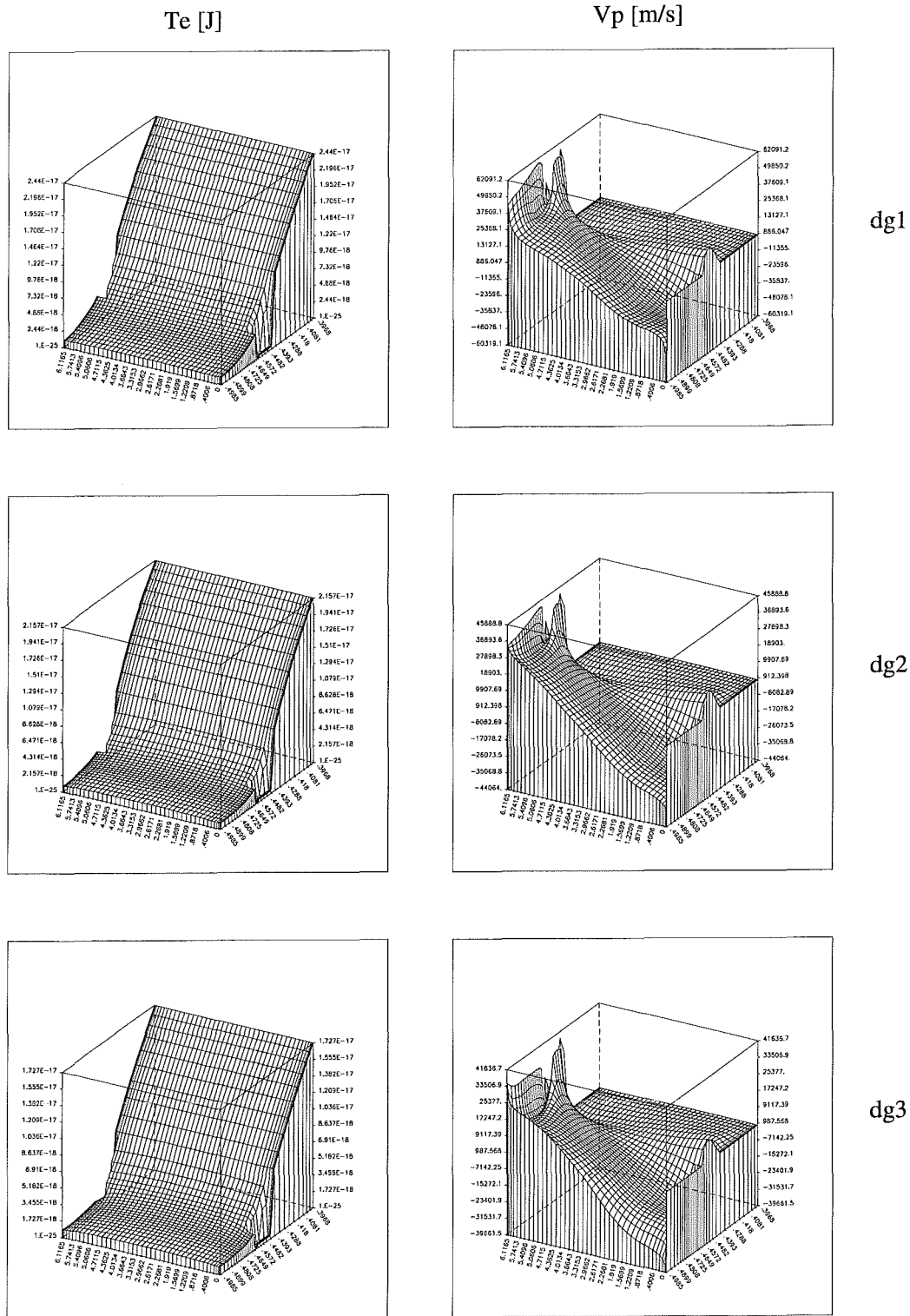


Abbildung 3.9: Parameter des Hintergrundplasmas aus der B2-EIRENE-Modellierung für die drei ohmsch geheizten Schüsse dg1 (oben), dg2 (mitte) und dg3 (unten). Links: Elektronentemperatur T_e . Rechts: Strömungsgeschwindigkeit $V_{||}$ der Ionen entlang des Magnetfeldes.

Ergebnisse der Simulation

Die Abbildungen 3.10, 3.11 und 3.12 zeigen die Ergebnisse für die Monte-Carlo-Simulation von Limiter-Kohlenstoff für die Spezies C^{1+} , C^{2+} und C^{3+} . In der linken Spalte ist jeweils der Ionendruck nT der einzelnen Spezies abgebildet, in der rechten deren Temperatur (mittlere kinetische Energie) im Verhältnis zur Hintergrundionentemperatur. Aufgrund der in Anhang E angesprochenen Probleme bei der Berechnung der Temperatur (Division durch eine verschwindende Dichte) geben wir eine solche nur für Bereiche an, in denen die Dichte über 5% des Maximalwertes lag, d. h. hier also in der Nähe des Limiters. Die Profile des Ionendrucks der einzelnen Spezies weisen durchweg eine starke Lokalisierung in der Nähe des Limiters auf, was in erster Linie auf die schnelle Ionisation der Teilchen zurückzuführen ist, die nicht durch Rekombinationsprozesse ausgeglichen wird. Betrachtet man die Profile der Temperaturverhältnisse, so erkennt man eine zunehmende Thermalisierung der Verunreinigungen von dg1 nach dg3, was der Erwartung entspricht, da die Dichten der Hintergrundteilchen von dg1 nach dg3 zunehmen und somit die Coulomb-Wechselwirkung mit den Hintergrundionen zunimmt. Es wird aber deutlich, daß die C^{3+} -Ionen in nur kleinen Gebieten die Hintergrundtemperatur angenommen haben und die C^{1+} - und C^{2+} -Ionen zumeist nicht einmal die halbe Hintergrundtemperatur besitzen. Dies steht im Einklang mit experimentellen Ergebnissen für die Temperatur von kurzlebigen Verunreinigungen in niedrigen Ladungszuständen (Hey 1994). Daß an manchen Stellen die Hintergrundtemperatur überschritten wird, ist durchaus nicht unphysikalisch und bedeutet einen wichtigen kinetischen Geschwindigkeitseffekt, denn die Temperatur stellt die Varianz der Verteilung im Geschwindigkeitsraum dar, und bei großen Abweichungen von einer einfachen Maxwell-Verteilung (zum Beispiel bei einer bimodalen Verteilung bestehend aus zwei schmalen Maxwell-Verteilungen) kann diese Varianz sehr groß sein, auch wenn die Gesamtenergie der Teilchen es nicht ist. Trotz der Unregelmäßigkeiten in den Temperatur-Profilen zeigt sich weiterhin deutlich, daß die Thermalisierung der Verunreinigungen in Richtung auf den Plasmakern abnimmt. Auch dies wird verständlich in Betracht der steigenden Elektronentemperatur und -dichte, die eine verstärkte Ionisation zur Folge hat, womit die Teilchen über zunehmend kürzere Zeiträume Energie von den Hintergrundteilchen aufnehmen können. Letztlich bestätigen die Ergebnisse die Notwendigkeit für eine kinetische Modellierung der Verunreinigungsionen, da die Thermalisierung, die Voraussetzung für fluidtheoretische Ansätze ist, für die unteren Ionisationsstufen nicht erfüllt ist. Auch läßt die Überschreitung der Hintergrundionentemperatur in einzelnen Fällen darauf schließen, daß die Verunreinigungen lokal starke Abweichungen von einer einfachen (leicht gestörten) Maxwell-Verteilung aufweisen.

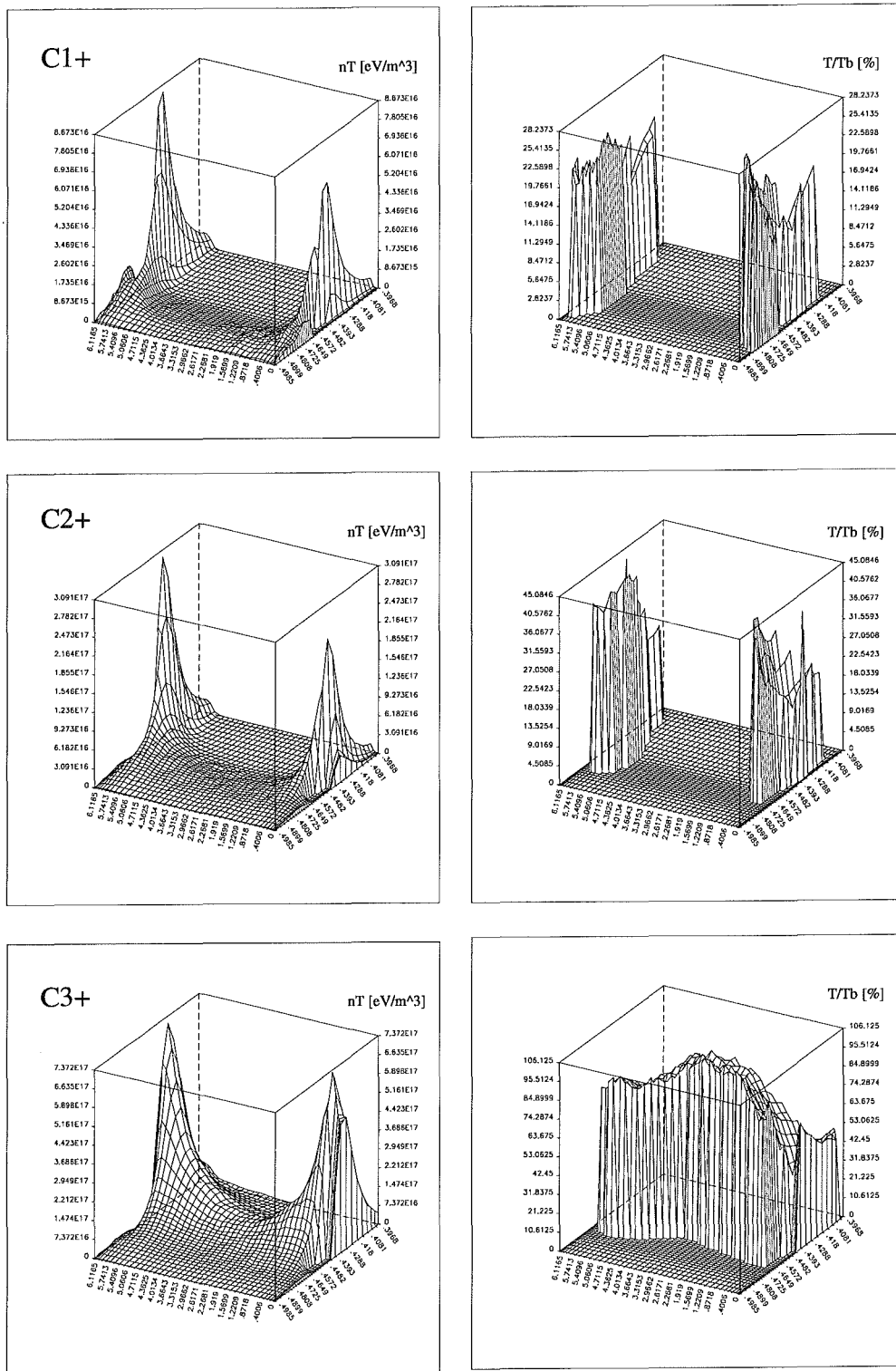


Abbildung 3.10: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das B2-EIRENE-Hintergrundplasma dgl. Links: Ionendruck der Spezies $C1^+$, $C2^+$ und $C3^+$. Rechts: Verhältnis der Ionentemperatur zur Hintergrundtemperatur.

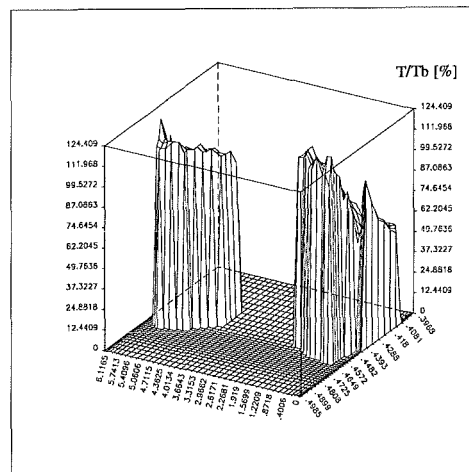
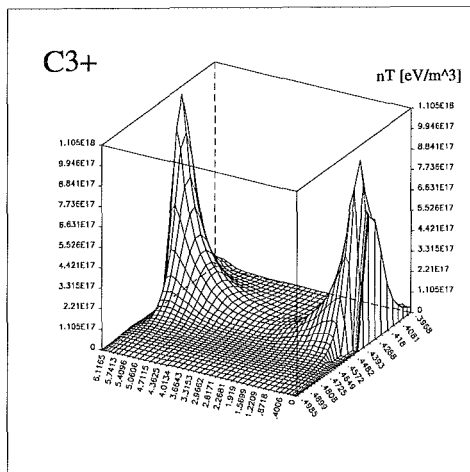
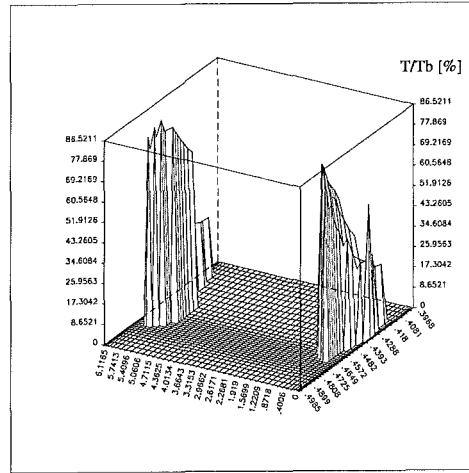
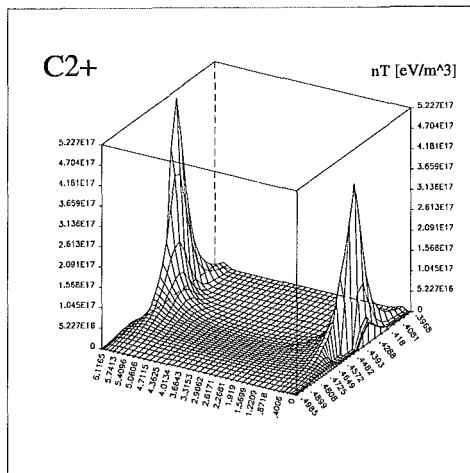
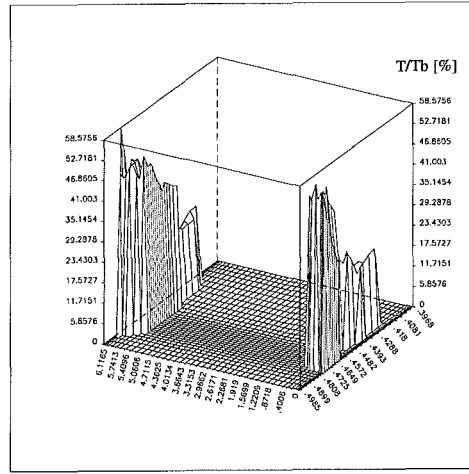
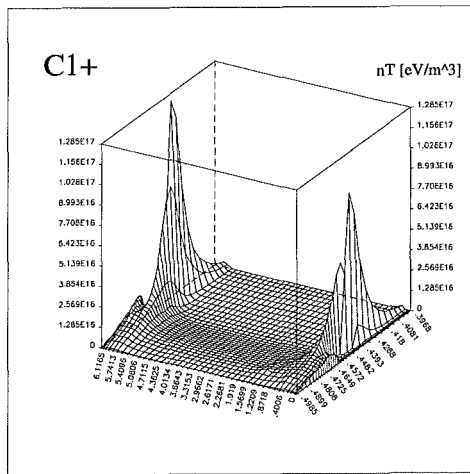


Abbildung 3.11: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das B2-EIRENE-Hintergrundplasma dg2. Links: Ionendruck der Spezies C^{1+} , C^{2+} und C^{3+} . Rechts: Verhältnis der Ionentemperatur zur Hintergrundtemperatur.

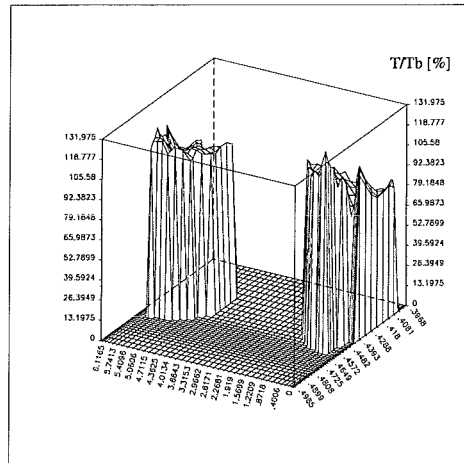
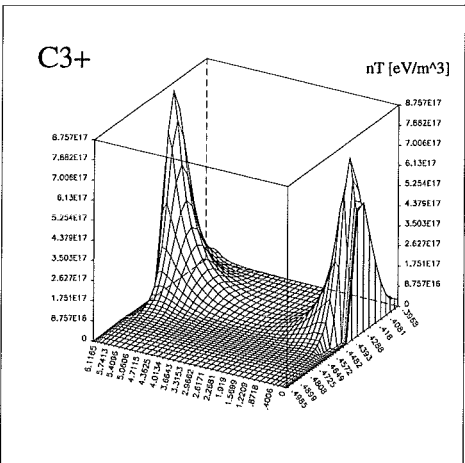
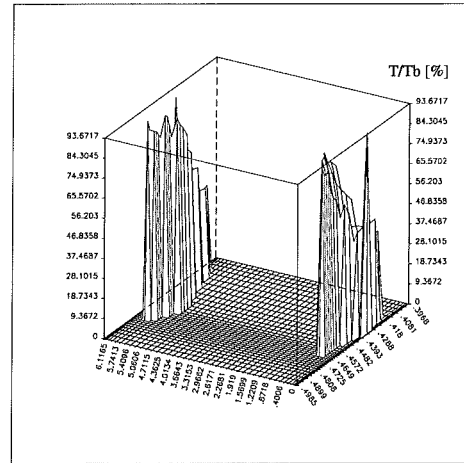
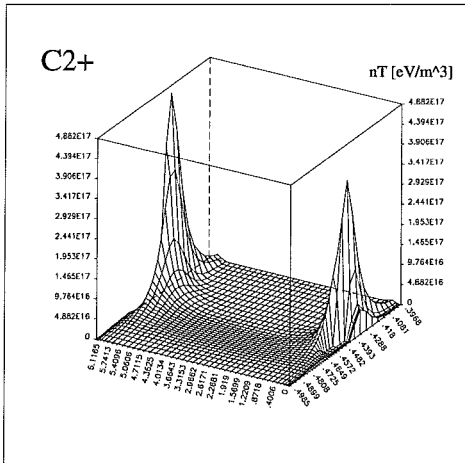
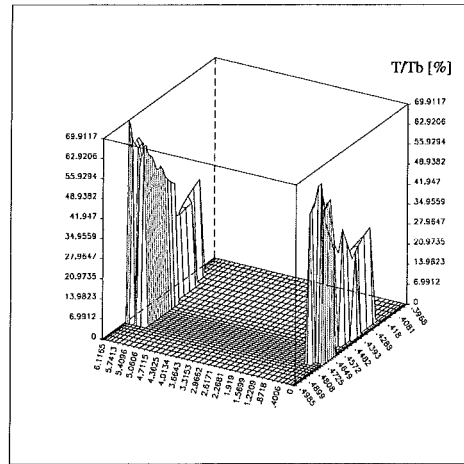
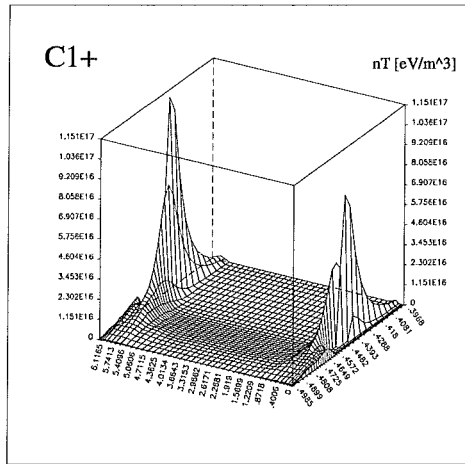


Abbildung 3.12: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das B2-EIRENE-Hintergrundplasma dg3. Links: Ionendruck der Spezies C^{1+} , C^{2+} und C^{3+} . Rechts: Verhältnis der Iontemperatur zur Hintergrundtemperatur.

3.3.2 Strahlungsprofil von Limiter-Kohlenstoff

Um zumindest eine qualitative Darstellung der Effekte zu erzielen, die mit den im letzten Abschnitt vernachlässigten elektrischen Feldern und Inhomogenitäten in den Plasma-Parametern des Hintergrundes auftreten, betrachten wir in diesem Abschnitt ein B2-EIRENE-Resultat für einen ohmsch geheizten Fall, das bereits von Keijers diskutiert wurde (Keijers 1996). Dieser Fall wurde für einen größeren Bereich des Randschichtplasmas in TEXTOR (von $r = 0.3\text{ m}$ bis $r = 0.5\text{ m}$) gerechnet. Die Abbildung 3.13 zeigt die Profile der Parameter n , T_i , T_e und $V_{||}$. Diese Plasma-Profile weisen höhere Temperaturen für die Ionen und Elektronen in der Abschälschicht auf, als die oben betrachteten Fälle dg1, dg2 und dg3 (Iontemperatur bis zu einer Größenordnung höher). Um die elektrischen Felder abzuschätzen, bedienen wir uns der folgenden Formeln: Für das elektrische Feld $E_{||}$ entlang der magnetischen Feldlinien setzten wir

$$E_{||} = -\frac{1}{e} \left(1.71 \frac{\partial T_e}{\partial l} + \frac{T_e}{n} \frac{\partial n}{\partial l} \right) . \quad (3.19)$$

Diese Gleichung entstammt der Impulsgleichung für die Elektronen in der Fluidnäherung. Die Ableitung nach l bezeichnet die Ableitung entlang der magnetischen Feldlinie (siehe auch Anhang D).

Für das radiale elektrische Feld $E_{\perp}$ setzten wir (Claaßen 1997)

$$E_{\perp} = \begin{cases} \frac{1}{n e} \frac{\partial n T_i}{\partial x} & \text{für } x < x_s \\ -\frac{3}{e} \frac{\partial T_e}{\partial x} & \text{für } x > x_s \end{cases} . \quad (3.20)$$

Darin ist x die Koordinate entlang der Flußflächennormalen und x_s bezeichnet die Lage der Separatrix ($x < x_s$ steht für einen Ort innerhalb der Separatrix). Die Ableitungen der Plasma-Parameter ermittelten wir durch Interpolation der gegebenen Profile. Für den anomalen Diffusionskoeffizienten $D_{\perp}$ setzten wir einen konstanten Wert von $1\text{ m}^2/\text{s}$ an. In diesen Rechnungen wurden die Effekte der elektrischen Felder und der Temperaturinhomogenitäten der Hintergrundionen auf die Strahlung von Kohlenstoff untersucht, dessen Quelle wieder der ALT-Limiter war (die Quellstärke der C^0 -Teilchen betrug für dieses Hintergrundplasma $\gamma_s = 0.60 \cdot 10^{18}\text{ s}^{-1}$). Wir betrachteten hierzu alle Ladungsstufen, d. h. C^0 bis C^{6+} , um auch einen Vergleich mit experimentellen Resultaten aus der Bolometrie-Diagnostik in TEXTOR (Rapp 1996) zu ermöglichen. Hierzu integrierten wir die berechnete Strahlungsleistungsdichte entlang der 25 Sichtlinien, die in Abbildung 3.14 dargestellt sind. Als Orientierung bei der Bewertung unserer Rechenergebnisse dient die Abbildung 3.15, die ein typisches Meßergebnis für einen ohmsch geheizten Schuß in einem frisch borierten TEXTOR-Plasma zeigt. Bei diesen ex-

perimentellen Ergebnissen wird davon ausgegangen, daß sie hauptsächlich auf Strahlung von Kohlenstoff- und Sauerstoffverunreinigungen zurückzuführen sind. Die Darstellung der Meßergebnisse in Abbildung 3.15 ist so gewählt, daß die korrespondierenden Sichtlinien sich für steigende p (lotrechter Abstand der Sichtlinien vom geometrischen Mittelpunkt des Poloidalschnitts) weiter entfernt vom Limiter befinden, links im Diagramm also der limiternahe und rechts der am weitesten vom Limiter entfernte Bereich im Plasma zur gemessenen Strahlung beiträgt. Es ist eine starke Lokalisierung der Strahlung in Limiternähe zu erkennen. Dieses Ergebnis soll als Leitfaden bei der Bewertung unserer Monte-Carlo-Resultate dienen.

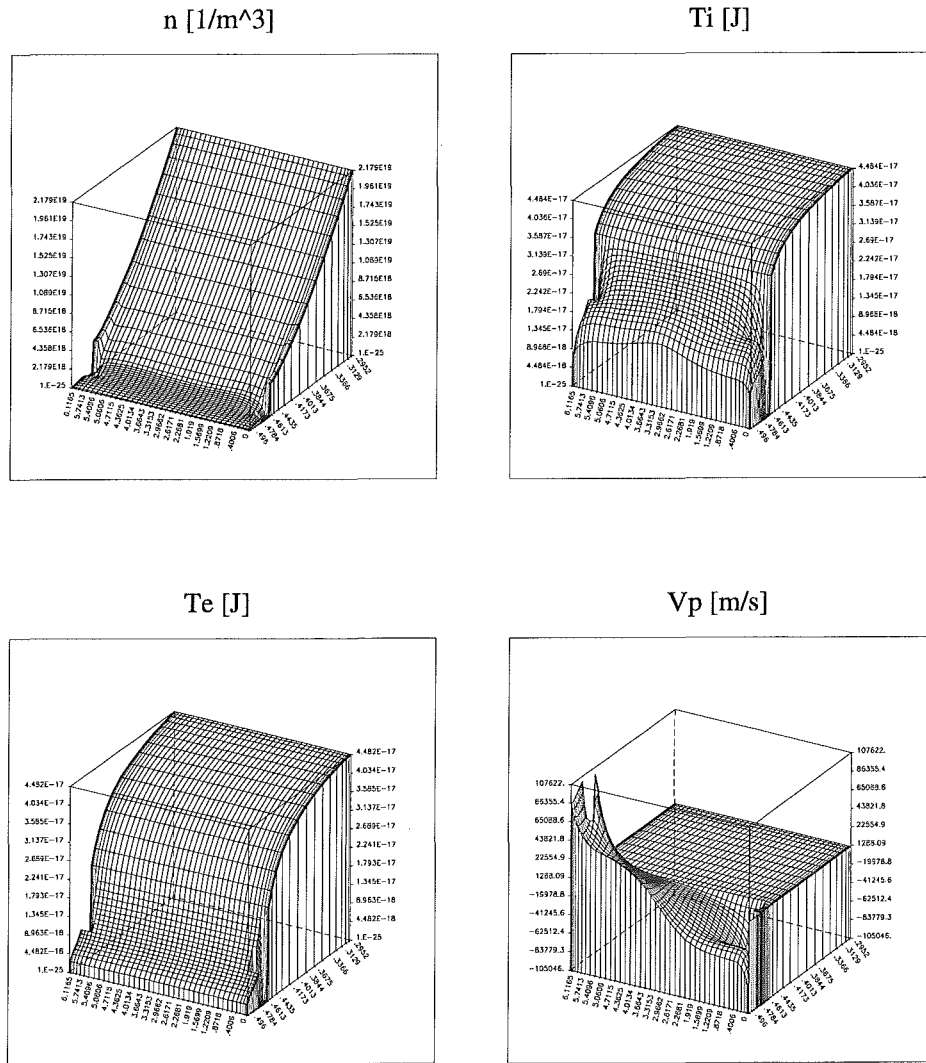


Abbildung 3.13: Parameter des Hintergrundplasmas aus der B2-EIRENE-Modellierung für den Randbereich von $r = 0.3\text{ m}$ bis $r = 0.5\text{ m}$ eines ohmsch geheizten Plasmas. Oben: Dichte n und Ionentemperatur T_i . Unten: Elektronentemperatur T_e und Strömungsgeschwindigkeit $V_{||}$ der Ionen entlang des Magnetfeldes.

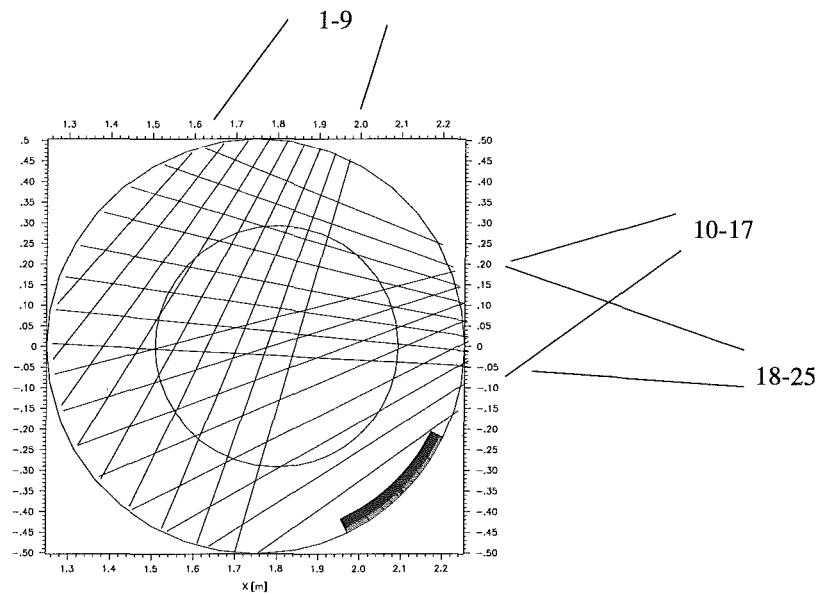


Abbildung 3.14: Schematische Darstellung der Bolometer-Sichtlinien im Poloidalschnitt von TEXTOR.

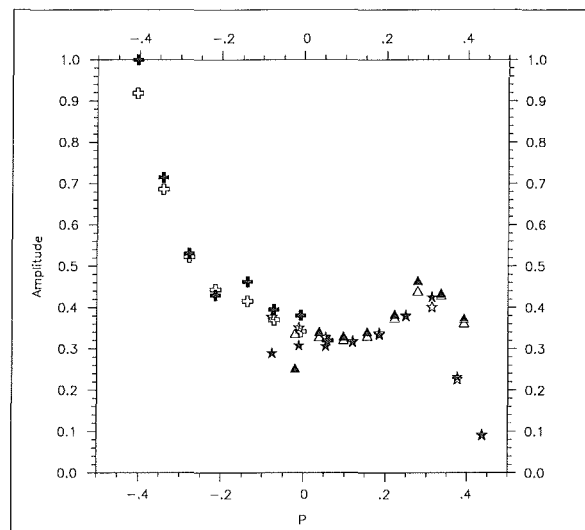


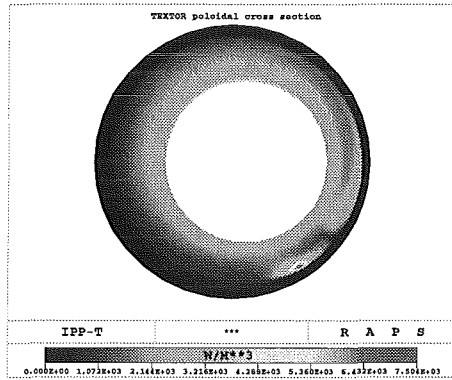
Abbildung 3.15: Typischer experimenteller Befund der Bolometer-Diagnostik in einem frisch torierten TEXTOR-Plasma (Rapp 1996). *: Sichtlinien 1-9, +: Sichtlinien 10-17, Δ : Sichtlinien 18-25.

Ergebnisse der Simulation

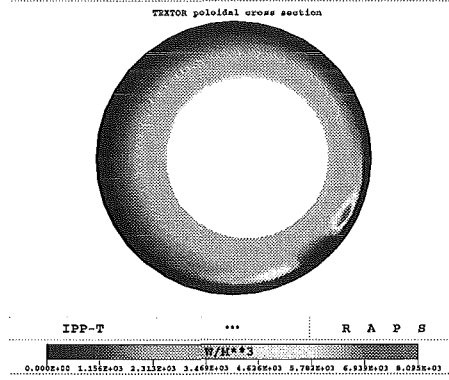
Abbildung 3.16 zeigt die zweidimensionalen Strahlungsleistungsdichte-Profile von Limiter-Kohlenstoff. Zum Test einzelner Effekte, die im letzten Abschnitt ausgelassen wurden, betrachteten wir den gesamten Transport der Kohlenstoffverunreinigungen, den Transport ohne die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift, den Transport ohne $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und ohne Thermokraft und zuletzt den Transport ohne $\mathbf{E}$ -Feld und ohne Einfluß von Inhomogenitäten im Hintergrundplasma. Die vier Resultate illustrieren ein Verhalten der Verunreinigungen, das sich gemäß der Diskussion im Anhang G erwarten läßt. Die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und die Thermokraft (die in Richtung steigender Hintergrundionentemperatur wirkt) verursachen eine starke Ausbreitung der geladenen Verunreinigungen vom Limiter weg, wobei die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift eine Asymmetrie in der Verteilung bewirkt, die Thermokraft jedoch – da die großen Temperaturgradienten in der Nähe der Limiterkanten auftreten – zu einer symmetrischen Verteilung (bzgl. des Limiters) führen. Ohne diese beiden Effekte nimmt die Lokalisierung der Strahlung in der Nähe des Limiters zu. Wird außerdem das parallele elektrische Feld, das ebenfalls seine maximalen Werte an den Limiterkanten besitzt, aus der Simulation ausgelassen, so sind die Strahlungsmaxima am Limiter noch stärker ausgeprägt, da dann ein Abpumpeffekt wegfällt ($E_{\parallel}$ weist auf den Limiter), der die Teilchen auf den Limiter treibt. Auffällig sind die niedrigen Werte für die Gesamtstrahlung in den einzelnen Fällen. Sie weist zwar die erwartete Tendenz auf, d. h. mit Fortfall der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift nimmt die Strahlung zunächst zu, da die Verunreinigungen nicht mehr (in der Abschälschicht) auf den Limiter getrieben werden, und nimmt bei Vernachlässigung der Thermokraft wieder ab (die Teilchen werden schneller am Limiter absorbiert), um bei Vernachlässigung des Pumpeffektes durch das $E_{\parallel}$ -Feldes wieder etwas zuzunehmen, doch liegen die konkreten Werte um ein bis zwei Größenordnungen unter typischen Werten für die Verunreinigungsstrahlung in TEXTOR für derartige Szenarien. Dies erklären wir mit einem nur ungenau bestimmten Wert für die Quellstärke γ_s und mit eventuell vernachlässigten Quellen für die Kohlenstoffteilchen (Wände, chemische Zerstäubung). Die Berechnung der Quellstärke hängt zum einen von einer sorgfältigen Bestimmung der Hintergrundparameter ab, deren Qualität wir hier nicht beurteilen können, zum anderen spielen aber auch Oberflächeneffekte am Limiter eine große Rolle (siehe Abschnitt 3.1.4 zur Diskussion der Bodhansky-Formel). Beide möglichen Fehlerquellen können in dieser Arbeit nicht in der angemessenen Tiefe diskutiert werden. Die Einbeziehung weiterer räumlicher Quellen für Kohlenstoff wäre zwar mit unserem Code DORIS einfach gewesen, doch mangelt es solchen Korrekturen an zuverlässigen Informationen über solche Quellen. Daß die physikalische Zerstäubung z. B. gegenüber der chemischen Zerstäubung (Aufbrechen von Kohlenstoffverbindungen) eine untergeordnete Rolle spielen kann wurde von Bogen und Rusbüldt (Bogen und Rusbüldt 1992) auf experimentellem Wege gezeigt.

Die Abbildung 3.17 zeigt die linienintegrierten Strahlungsleistungsdichten für die vier Monte-Carlo-Simulationen. Hier fällt erneut das Resultat für den Transport unter Einbeziehung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift auf, da hierbei eine starke Akkumulation auf der dem Limiter gegenüberliegenden Seite zu erkennen ist. Auch ruft die Thermokraft eine stärkere Akkumulation der Strahlung gegenüber dem Limiter hervor, was in Einklang mit der obigen Diskussion der zweidimensionalen Strahlungsdichte-Profile steht. Ohne die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift zeigen die Profile eine große Ähnlichkeit zu den experimentellen Resultaten der Abbildung 3.15, wobei die Übereinstimmung für die Simulation ohne elektrische Felder und ohne Thermokraft am besten ist, da hierbei die stärkste Lokalisierung der Strahlung am Limiter zu erkennen ist. Hier wirft sich die Frage auf, ob eventuell die Näherungsformel (3.20) eine zu ungenaue Beschreibung des stark wirksamen radialen elektrischen Feldes liefert. Für künftige Anwendungen wäre es sicher ratsam gerade diesen dominanten Effekt zuverlässig zu erfassen. Trotzdem sollten die Simulationsergebnisse nicht überinterpretiert werden, da, wie bereits angesprochen, auch vernachlässigte Quellen die Resultate ändern können. Überdies gibt die Bolometer-Diagnostik Auskunft über die Strahlung aller strahlenden Teilchen (und auch den Energien von Neutronen), so daß die von uns betrachteten physikalisch zerstäubten Kohlenstoffteilchen nur einen Teil des experimentellen Resultats bestimmen. Als Ergebnis unserer Rechnungen läßt sich festhalten, daß die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und die Thermokraft dominante Effekte in unserem Transportmodell ausmachen, die die Resultate in signifikanter Weise beeinflussen.

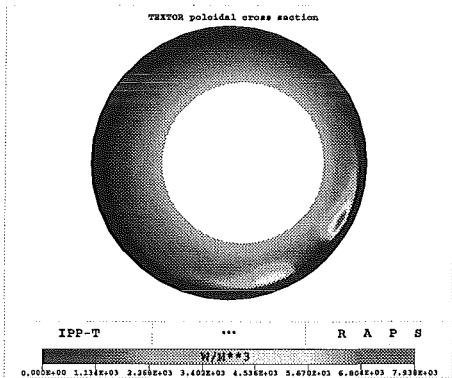
$$P_{\text{rad}} = 8072 \text{ W}$$



$$P_{\text{rad}} = 11110 \text{ W}$$



$$P_{\text{rad}} = 7347 \text{ W}$$



$$P_{\text{rad}} = 7523 \text{ W}$$

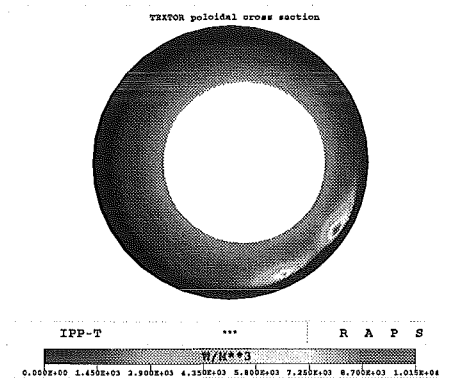


Abbildung 3.16: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für die gesamte Strahlungsleistungsdichte von Limiter-Kohlenstoff auf dem B2-EIRENE-Hintergrundplasma von Abschnitt 3.2.2. Oben links: Berücksichtigung des gesamten Transports in der Rechnung. Oben rechts: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift. Unten links: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und der Thermokraft. Unten rechts: Vernachlässigung des gesamten elektrischen Feldes und aller Effekte infolge von Inhomogenitäten im Hintergrundplasma. Für jeden Fall ist außerdem die Gesamtstrahlung P_{rad} angegeben.

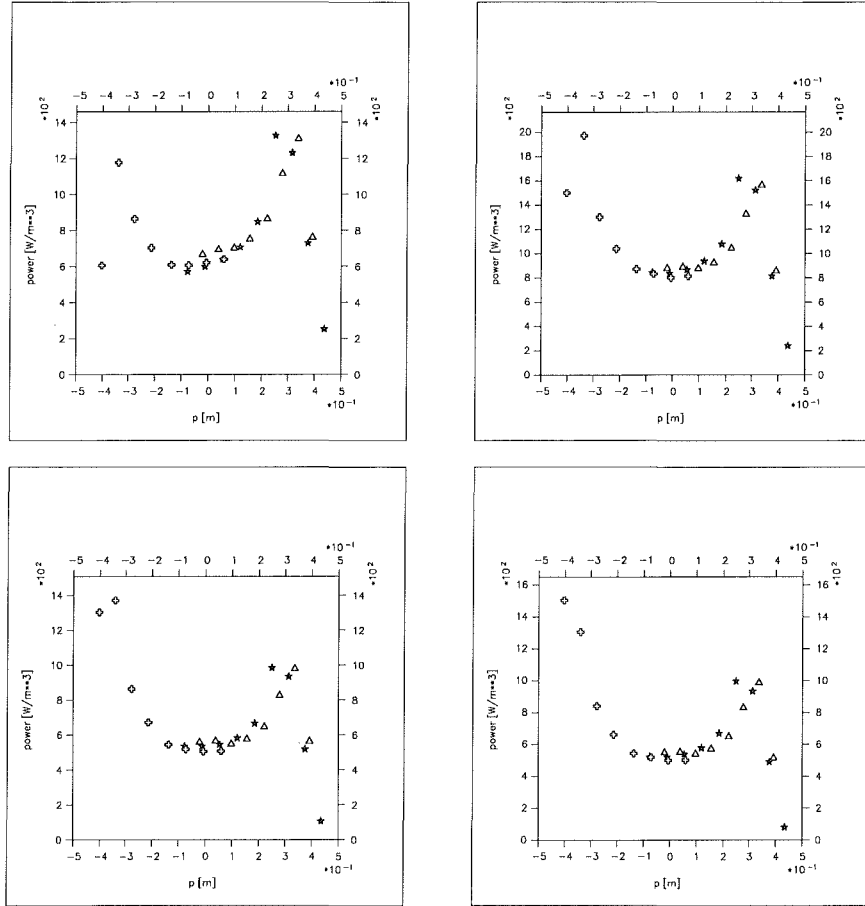


Abbildung 3.17: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für die Gesamtstrahlung von Limiter-Kohlenstoff auf dem B2-EIRENE-Hintergrundplasma von Abschnitt 3.2.2, linienintegriert über die Bolometer-Sichtlinien. $\star$: Sichtlinien 1-9, $+$: Sichtlinien 10-17, Δ : Sichtlinien 18-25. Oben links: Berücksichtigung des gesamten Transports in der Rechnung. Oben rechts: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift. Unten links: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und der Thermokraft. Unten rechts: Vernachlässigung des gesamten elektrischen Feldes und aller Effekte infolge von Inhomogenitäten im Hintergrundplasma.

3.3.3 Dichte-Profile von Limiter-Kohlenstoff; Vergleich der Thermokräfte der Codes DORIS und DIVIMP

In diesem Abschnitt soll ein wesentlicher Unterschied zwischen den Codes DIVIMP (Stangeby 1992) bzw. IMPMC (Takizuka und Shimizu 1994) und unserem Code DORIS illustriert werden, nämlich die Modellierung der Thermokräfte. Für eine ausführlichere Diskussion der Unterschiede in den Transportmodellen sei auf Anhang H verwiesen. Wir benutzten diesselben Hintergrundplasma-Profile wie in Abschnitt 3.3.2 beschrieben und berücksichtigten – außer der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift – sämtliche Transporteffekte, wobei wir jedoch zwei unterschiedliche Rechnungen ansetzten: In einer Rechnung verwendeten wir das von uns abgeleitete Modell für die Thermokraft, indem wir eine Coulomb-Streuung an einer Störung der Hintergrund-Maxwell-Verteilung einbezogen. In einer zweiten Rechnung verwendeten wir stattdessen die approximative Formel (1.64) zur Beschreibung der Thermokraft, wie es auch in den Codes DIVIMP und IMPMC geschieht (siehe die Diskussion in Abschnitt 1.5.1). Die sonstigen Parameter und Details der Rechnungen sind bereits in Abschnitt 3.3.2 beschrieben worden. Untersucht wird die Auswirkung der unterschiedlichen Ansätze für die Thermokraft auf die Dichteverteilung von Kohlenstoffverunreinigungen.

Ergebnisse der Simulation

Die Abbildungen 3.18 und 3.19 zeigen die Dichte-Profile der Spezies C^{1+} bis C^{6+} entlang den Flußflächen bei $r = 0.48$ m (innerhalb der Abschälschicht) bzw. bei $r = 0.458$ m (in der Nähe der Separatrix). Innerhalb der Abschälschicht, in der Nähe des Limiters (desen Mitte beim Poloidalwinkel 0 bzw. 2π liegt), treten starke Gradienten der Hintergrundionentemperatur auf, die eine starke Thermokraft zur Folge haben. In diesem Gebiet ist der Unterschied zwischen den beiden unterschiedlich gewonnenen Simulationsergebnissen signifikant. Zwar sind die Dichte-Profile der C^{1+} -Ionen nahezu identisch (diese Spezies ist zu kurzlebig, um von der Thermokraft allzu weit vom Limiter weggetrieben zu werden), doch unterscheiden sich die C^{2+} - und C^{3+} -Dichten um bis zu drei Größenordnungen. Es zeigt sich, daß die approximative Thermokraft den Effekt der Temperaturgradienten stark überschätzt und die Teilchen sich viel weiter entlang der magnetischen Feldlinien in das Plasma hinein bewegen. Für die höheren Ladungsstufen nähern sich die Profile wieder einander, was darauf schließen läßt, daß diese Spezies bereits annähernd maxwellisiert und thermalisiert sind. Diese Spezies erfüllen also schon die Voraussetzungen für ein Fluid-Modell, weshalb die Unterschiede in den Simulationsrechnungen nur klein sind. In der Nähe der Separatrix spielen die Thermokräfte keine große Rolle mehr, so daß die Form der Profile für beide Simulationsrechnungen sehr ähnlich ist. Die Absolutwerte der Dichten unterscheiden sich aber merklich (bis zu einem Faktor 2), was darauf zurückzuführen ist, daß die

Verteilung der Verunreinigungen innerhalb der Separatrix durch die unterschiedlichen Quellen in der Abschälschicht beeinflusst wird, d. h. die stark verschiedenen Dichte-Profile in der Abschälschicht, die eine direkte Folge der Modelle für die Thermokraft sind, spiegeln sich wieder in Bereichen, in denen die Thermokraft nicht mehr relevant ist. Man erkennt, daß die niedriggeladenen Verunreinigungsspezies einer sorgfältigen kinetischen Beschreibung bedürfen und sich nicht mehr den Voraussetzungen eines Fluid-Modells fügen. Insbesondere gilt dies für eine zuverlässige Modellierung der Strahlungsprofile von Niedrig-Z-Elementen, da hierbei vor allem die niedrigen Ionisationsstufen dominieren.

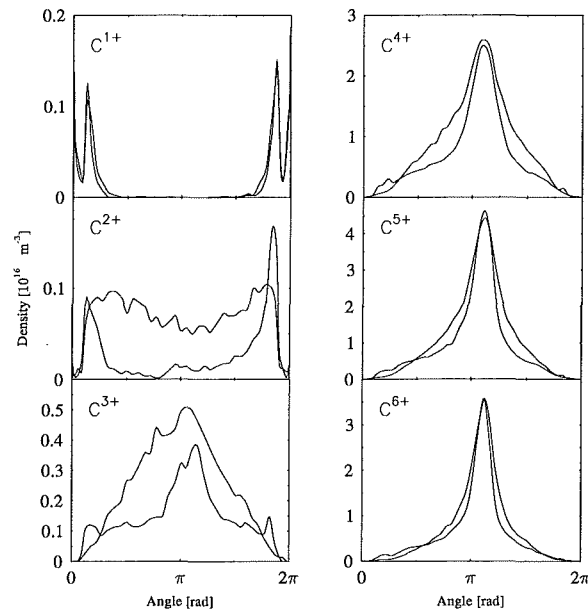


Abbildung 3.18: Vergleich der Kohlenstoffdichten entlang der Flußfläche bei $r = 0.48 \text{ m}$. Gestrichelte Linien: Rechnung mit approximativer Thermokraft. Durchgezogene Linien: Rechnung mit der korrekten kinetischen Thermokraft.

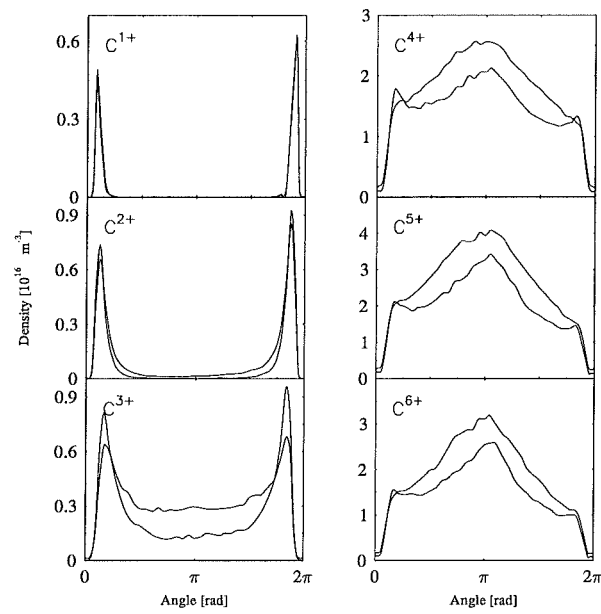


Abbildung 3.19: Vergleich der Kohlenstoffdichten entlang der Flußfläche bei $r = 0.458 \text{ m}$. Gestrichelte Linien: Rechnung mit approximativer Thermokraft. Durchgezogene Linien: Rechnung mit der korrekten kinetischen Thermokraft.

3.4 Simulationen auf semi-empirischem Modell-Plasmahintergrund

In diesem Abschnitt wollen wir weitere Ergebnisse für Profile der Verunreinigungsstrahlung vorstellen, wobei wir aber auf einfachere Profile für das Hintergrundplasma zurückgreifen, als die oben mit dem B2-EIRENE-Code berechneten. Sie fußen auf eindimensionalen Modell-Gleichungen, die in empirischer Weise auf den zweidimensionalen Poloidalschnitt von TEXTOR extrapoliert werden. Durch Verwendung dieser analytisch vollständig gegebenen Profile umgehen wir die numerischen Schwierigkeiten bei der Interpolation der Plasma-Parameter aus den B2-EIRENE-Resultaten. Das Modell wurde gemeinsam mit Tokar (Tokar 1997) entwickelt und wird im Anhang D erläutert. Für die Eck-Parameter in den Modell-Gleichungen verwendeten wir die beiden in Tabelle 3.4 aufgeführten Sätze. Die Abbildungen 3.20 und 3.21 zeigen die Profile der Plasma-Parameter für diese Werte. Der Parametersätze OH-1 und OH-2 wurden dabei so gewählt, daß die Plasma-Profile größenordnungsmäßig in der Nähe der Hintergrundplasma-Parameter K-OH des Abschnitts 3.2.2 liegen. Die Gradienten der Hintergrundionentemperatur entlang der magnetischen Feldlinien sind bei diesen Profilen jedoch weitaus kleiner als die von K-OH, was einen weniger starken Effekt der Thermokraft zur Folge hat. Die radialen Gradienten der Temperaturen, die nach Formel (3.20) das radiale elektrische Feld bestimmen, sind größer als in K-OH, womit die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift stärker wirksam wird. Der Parameter-Satz OH-1 liefert niedrigere Temperaturen und Dichten innerhalb der Abschälsschicht als OH-2. Die Simulation erfolgte auf einem Rechengebiet, das den Bereich zwischen $r = 0.3\text{ m}$ und $r = 0.5\text{ m}$ des TEXTOR-Poloidalschnitts umfaßt. Für den anomalen Diffusionskoeffizienten $D_{\perp}$ setzten wir wieder $1\text{ m}^2/\text{s}$. Die elektrischen Felder berechneten wir erneut mit den Formeln (3.19) und (3.20). Erneut betrachten wir den ALT-Limiter als einzige Quelle für die Verunreinigungen, wobei wir uns für die Betrachtung von Neon der einfachen Näherung bedienen, für die Quelle der Ne^0 -Teilchen dieselbe Energie- und Winkelverteilung der physikalisch zerstäubten C^0 -Teilchen anzunehmen (in Ermangelung eines besseren Ansatzes). Die Quellstärken betragen: $\gamma_s = 0.12 \cdot 10^{20}\text{ s}^{-1}$ für OH-1 und $\gamma_s = 0.20 \cdot 10^{19}\text{ s}^{-1}$ für OH-2. Wie in Abschnitt 3.3.2 berechneten wir die Strahlungsleistungsdichten aller Ladungsstufen von Kohlenstoff bzw. Neon und analysierten die Ergebnisse für die Sichtlinien der Bolometer-Diagnostik. Für jeden Satz von Plasma-Parametern betrachteten wir jeweils den kompletten Transport der Verunreinigungen und den Transport unter Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift, die hier den stärksten Effekt ausmachte.

	$n^S(L)$	$T_i^S(L)$	$T_e^S(L)$	δ_Γ	δ_{T_i}	δ_{T_e}	n^C	T_i^C	T_e^C
OH-1	$1.5 \cdot 10^{19}$	150	70	0.02	0.03	0.10	$7.0 \cdot 10^{19}$	2500	2000
OH-2	$5.0 \cdot 10^{18}$	200	150	0.01	0.03	0.02	$5.0 \cdot 10^{19}$	1000	1000
	m^{-3}	eV	eV	m	m	m	m^{-3}	eV	eV

Tabelle 3.5: Parameter für das semi-empirische Modell aus Anhang D.

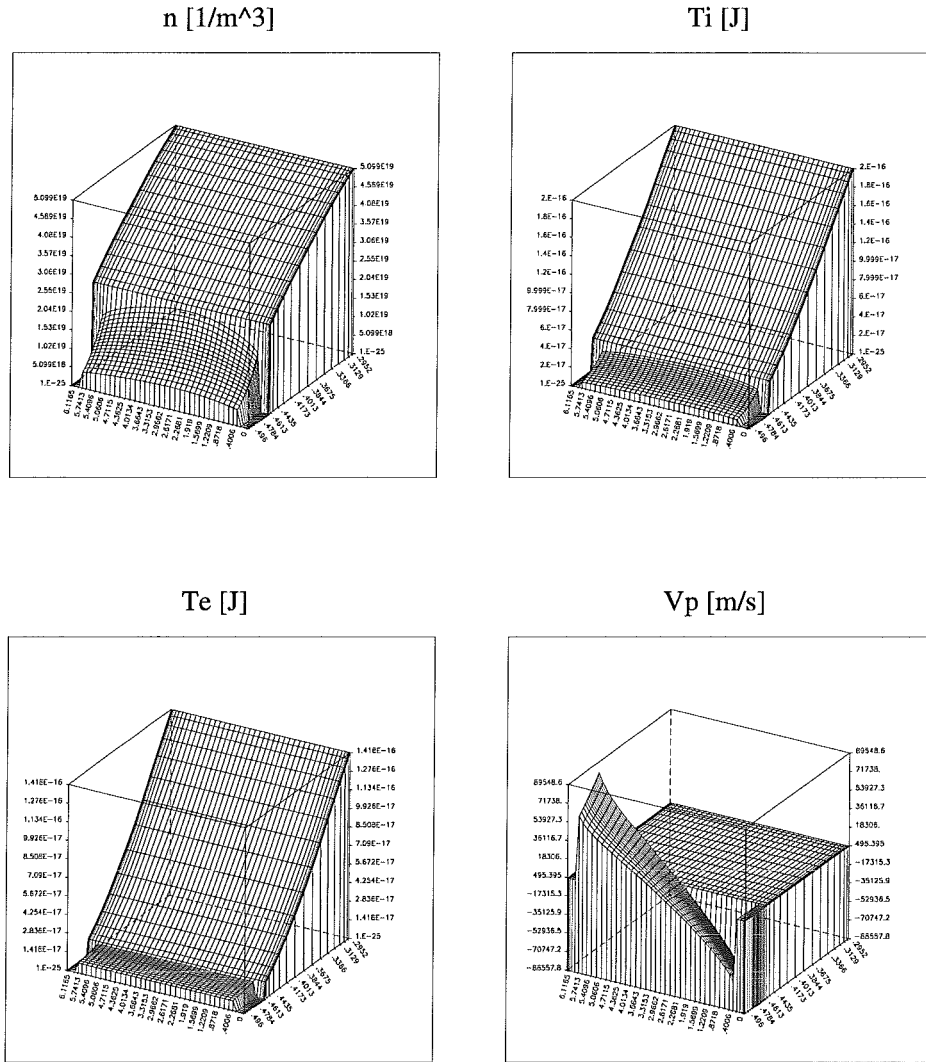


Abbildung 3.20: Parameter des Hintergrundplasmas berechnet mit dem semi-empirischen Modell aus Anhang D und dem Parametersatz OH-1 aus Tabelle 3.4. Oben: Dichte n und Ionentemperatur T_i . Unten: Elektronentemperatur T_e und Strömungsgeschwindigkeit $V_{||}$ entlang des Magnetfeldes.

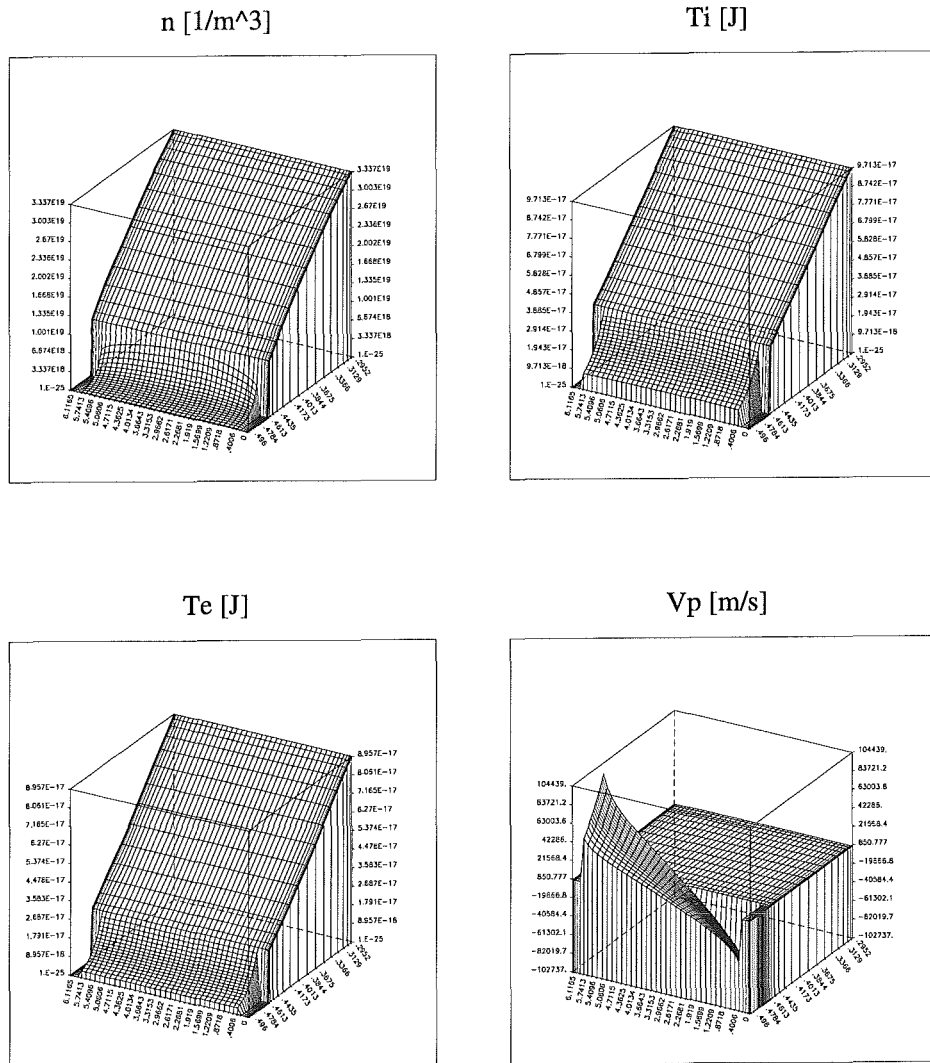


Abbildung 3.21: Parameter des Hintergrundplasmas berechnet mit dem semi-empirischen Modell aus Anhang D und dem Parametersatz OH-2 aus Tabelle 3.4. Oben: Dichte n und Ionentemperatur T_i . Unten: Elektronentemperatur T_e und Strömungsgeschwindigkeit $V_{||}$ entlang des Magnetfeldes.

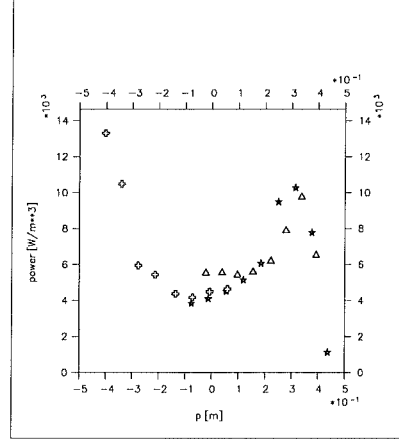
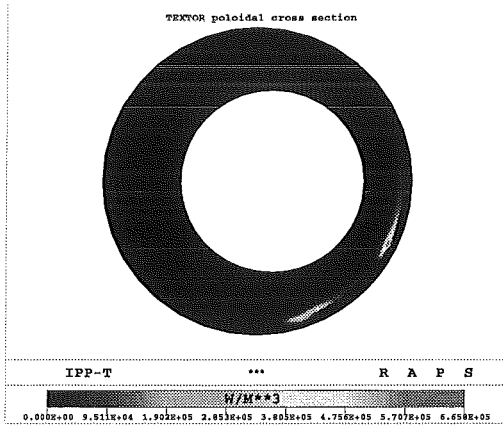
3.4.1 Strahlungsprofil von Limiter-Kohlenstoff

Die Abbildungen 3.22 und 3.23 zeigen die zweidimensionalen Strahlungsprofile und sichtlinienintegrierten Strahlungsdichten der Spezies C^{1+} bis C^{6+} für die Hintergrundplasmen OH-1 und OH-2. Im Gegensatz zu den Resultaten des Abschnitts 3.3.2 zeigen die zweidimensionalen Profile der Strahlungsleistungsdichte eine weitaus stärkere Lokalisierung in der Nähe des Limiters, wobei im Plasma OH-2 eine etwas stärkere Verschmierung der Strahlung als im Plasma OH-1 zu erkennen ist. Die Gesamtstrahlung ist bei beiden um ein mehrfaches höher als in den entsprechenden Ergebnissen für das Plasma K-OH, was primär durch die höheren Quellstärken für die Verunreinigungen bedingt wird. Die höheren Quellstärken wiederum sind zum einen eine Folge der unterschiedlichen Geometrie des ALT-Limiters, die den Rechnungen zugrundegelegt wurde (in diesem Abschnitt näherte eine rechteckige Aussparung im Rechengitter den Limiter an (siehe Abbildung D.1), in den Rechnungen der vorhergehenden Abschnitte wurde eine realistischere Anordnung betrachtet (siehe Abbildung 3.2)) und zum anderen eine Folge der höheren Deuteronenflüsse, die auf den Limiter auftreffen. Daß die Quellstärke für den Fall OH-1 größer ist, als für OH-2 schlägt sich in einer ungefähr dreimal größeren Gesamtstrahlung in den Simulationen auf OH-1 gegenüber denen auf OH-2 nieder. Weitere Details lassen sich in den zweidimensionalen Strahlungsprofilen nicht ausmachen. Die linienintegrierten Profile hingegen weisen markantere Unterschiede auf. Sowohl für OH-1 wie auch OH-2 führt die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift zu einer starken Akkumulation der Strahlung auf der dem Limiter entgegengesetzten Seite. Wie oben angemerkt, ist dies auch der dominante Effekt, der die in der Strahlung dominierenden Verunreinigungen vom Limiter wegtreibt, d. h. die niedrigionisierten Spezies C^{1+} bis C^{3+} . Ohne diese Drift würden die stark strahlenden Verunreinigungen vermehrt vom Limiter absorbiert werden und trügen nicht mehr zur Gesamtstrahlung bei. Dies bestätigt sich auch in den um den Faktor 2 verminderten Werten für die gesamte Strahlung in den Rechnungen ohne den $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Transport. Dieser Effekt war in den Rechnungen des Abschnitts 3.3.2 genau umgekehrt. Dort konnte die Thermokraft bei Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift stärker wirksam werden und die vom Limiter fortgetragenen Verunreinigungen länger zur Strahlung beitragen. In den Rechnungen dieses Abschnitts ist die Thermokraft nur klein und kann dies nicht bewirken. Daß die Resultate für OH-1 eine stärkere Lokalisierung der Strahlung am Limiter aufweist als für OH-2, kann mit den höheren Elektronentemperaturen und -dichten in der Abschälschicht für den Fall OH-2 erklärt werden. Die Verunreinigungen werden schneller in die weniger stark strahlenden Ladungsstufen ionisiert, womit die Strahlung fernab vom Limiter im Verhältnis kleiner wird. Der Vergleich unserer berechneten Sichtlinien-Profile mit dem experimentellen Resultat aus Abbildung 3.15 zeigt in keinem Fall eine klare Übereinstimmung. Das Resultat der Rechnung ohne $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Transport für OH-2 kommt dem beob-

achteten Ergebnis zwar sehr nah, doch ändert sich die Profilform bei Änderung der Plasma-Parameter, sprich: bei Betrachtung des Plasmas OH-1, so stark, daß man eher von einer zufälligen Übereinstimmung ausgehen muß. Letztlich verdeutlichen diese Rechnungen die Notwendigkeit einer sorgfältigen Abstimmung der modellierten Plasma-Parameter mit den realen Gegebenheiten, womit wieder vornehmlich die elektrischen Felder und die Quellstärken gemeint sind. Der Einfluß dieser Größen auf das Transportverhalten der Verunreinigungen ist zu ausgeprägt, als daß sich für verschiedenartige Plasma-Szenarien Aussagen allgemeiner Gültigkeit ableiten ließen.

Carbon Radiation

$$P_{\text{rad}} = 74750 \text{ W}$$



$$P_{\text{rad}} = 44500 \text{ W}$$

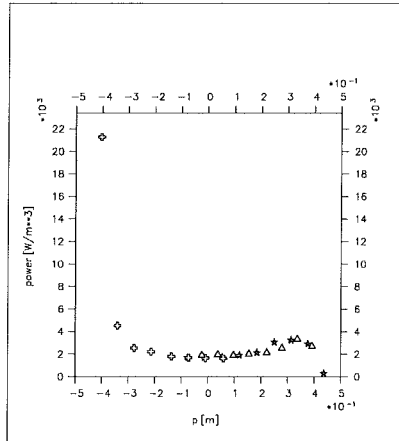
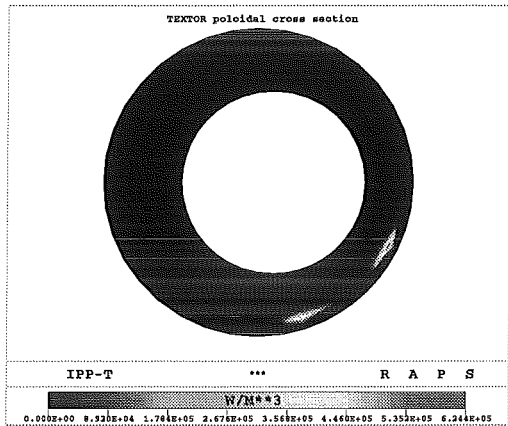
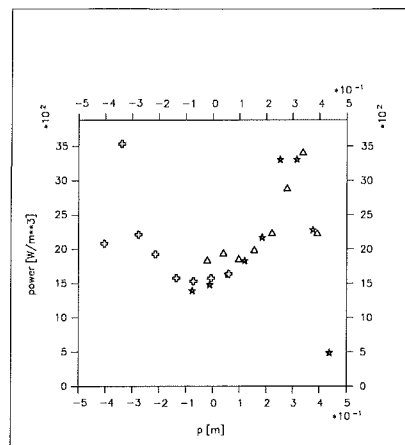
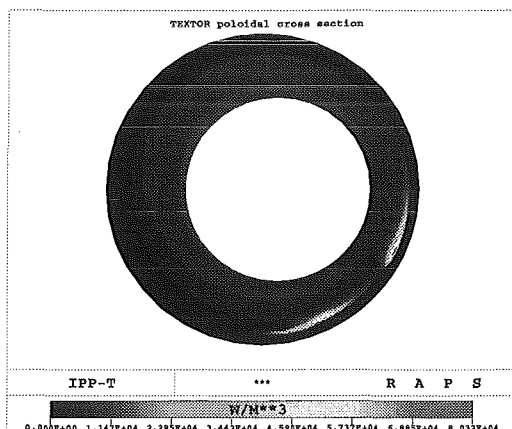


Abbildung 3.22: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das Hintergrundplasma OH-1. Links: Gesamte Strahlungsleistungsdichte der Kohlenstoffverunreinigungen in W/m^3 . Rechts: Linienintegrierte Strahlungsleistungsdichte für die Bolometersichtlinien. $\star$: Sichtlinien 1-9, $+$: Sichtlinien 10-17, Δ : Sichtlinien 18-25. Oben: Berücksichtigung des gesamten Verunreinigungstransports. Unten: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift. Für jeden Fall ist außerdem die Gesamtstrahlung P_{rad} angegeben.

$$P_{\text{rad}} = 23236 \text{ W}$$

Carbon Radiation



$$P_{\text{rad}} = 15719 \text{ W}$$

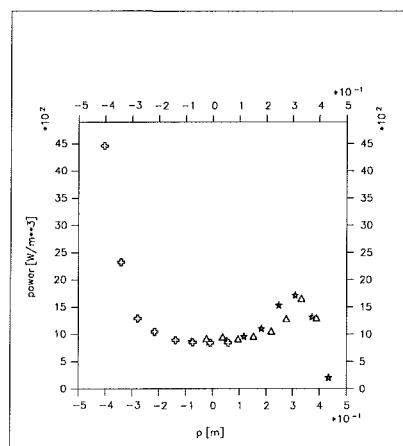
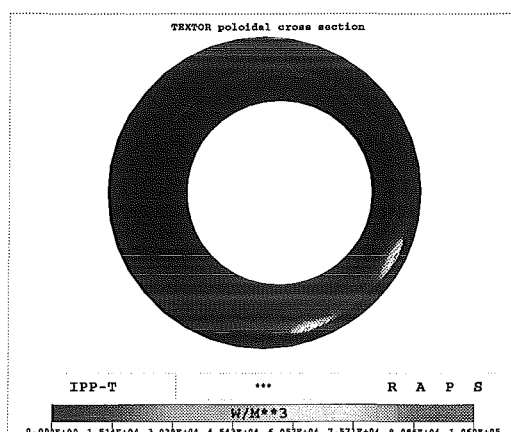


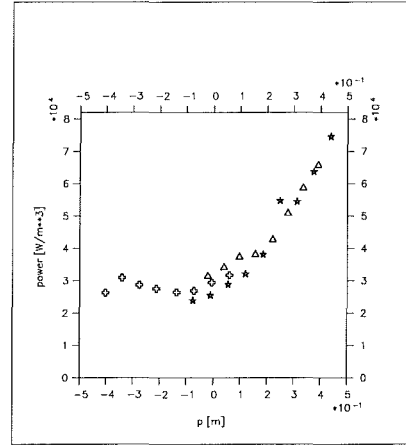
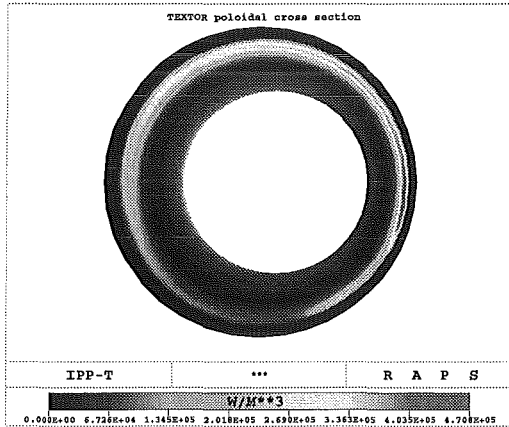
Abbildung 3.23: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das Hintergrundplasma OH-2. Links: Gesamte Strahlungsleistungsdichte der Kohlenstoffverunreinigungen in W/m^3 . Rechts: Linienintegrierte Strahlungsleistungsdichte für die Bolometer-sichtlinien. $\star$: Sichtlinien 1-9, $+$: Sichtlinien 10-17, Δ : Sichtlinien 18-25. Oben: Berücksichtigung des gesamten Verunreinigungstransports. Unten: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift. Für jeden Fall ist außerdem die Gesamtstrahlung P_{rad} angegeben.

3.4.2 Strahlungsprofil von Limiter-Neon

Die Abbildungen 3.24 und 3.25 zeigen die zweidimensionalen Strahlungsprofile und ihre linienintegrierte Auswertung für Neon für die Hintergrundplasmen OH-1 und OH-2. Die zweidimensionalen Strahlungsprofile zeigen sowohl für OH-1 als auch für OH-2 weitaus drastischere Unterschiede zwischen den Rechnungen mit und ohne $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift als die Resultate für Kohlenstoff. Dies liegt darin begründet, daß bei Neon vorwiegend die Spezies Ne^{3+} bis Ne^{7+} die Linienstrahlung dominieren. Diese Spezies sind langlebiger als die stark strahlenden Kohlenstoffionen C^{1+} bis C^{3+} , so daß der Transport des Neons vom Limiter weg eine viel deutlichere Spur im Strahlungsprofil hinterläßt als beim Kohlenstoff, wo die strahlenden Ladungsstufen „auf dem Weg“ ionisiert werden. Wie beim Kohlenstoff ist die Gesamtstrahlung im Plasma OH-1 höher als in OH-2, was wir wieder mit den höheren Elektronentemperaturen und -dichten in OH-1 erklären, die eine Ionisation in die höchsten, wenig strahlenden Zustände begünstigt. Betrachtet man die Sichtlinien-Resultate, so zeigen sich für Neon weniger deutliche Unterschiede zwischen OH-1 und OH-2 als für Kohlenstoff (abgesehen von den Absolutwerten), was ein Hinweis darauf ist, daß die dominierenden Linienstrahler unter den Neon-Ionen weniger sensitiv sind gegenüber den Details der Plasma-Profile am Limiter, da sie sich bereits weit in das Plasma hinein bewegt haben. Für die Verunreinigung Neon stand uns kein „typisches“ experimentelles Resultat zur Verfügung, doch ist bekannt, daß Neon eine starke Tendenz besitzt, einen nahezu homogenen poloidalen Strahlungsgürtel auszubilden. Dies ist in unseren Rechnungen nicht aufgetreten, doch kann unsere einfache Modell-Quelle für diese Verunreinigung (Energie- und Winkelverteilung von zerstäubtem Kohlenstoff übernommen) sicherlich nicht in Anspruch nehmen, eine gute Beschreibungsgrundlage für die realen Verhältnisse abzugeben. Die hier gezeigten Resultate sollen vielmehr der exemplarischen Illustration der Möglichkeiten der Transportmodellierung mit unserem Code DORIS dienen und überdies einige wesentliche Unterschiede zwischen den Niedrig-Z-Verunreinigungen Kohlenstoff und Neon herausstellen, die darauf begründet sind, daß die Linienstrahlung bei Kohlenstoff von den niedrigsten Ladungsstufen und bei Neon von den mittleren Ladungsstufen dominiert wird.

Neon Radiation

$$P_{\text{rad}} = 392238 \text{ W}$$



$$P_{\text{rad}} = 271546 \text{ W}$$

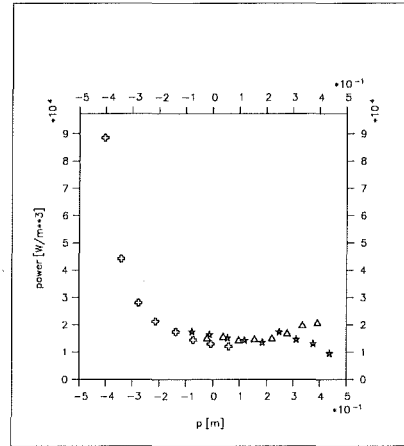
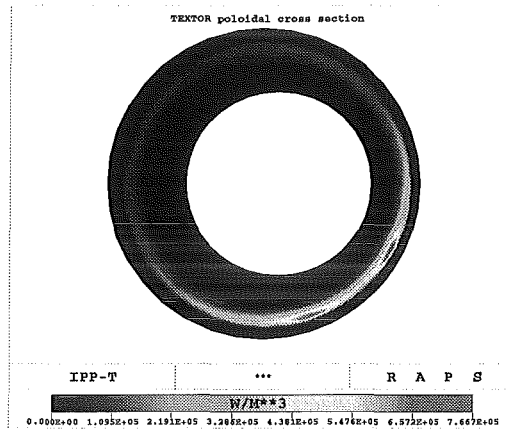
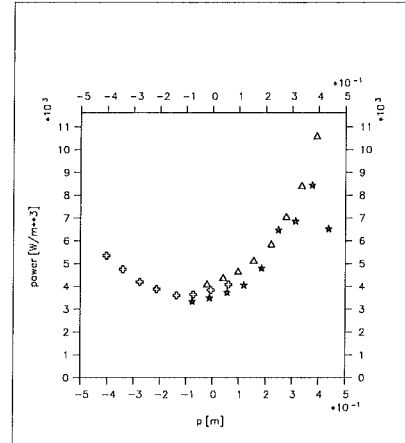
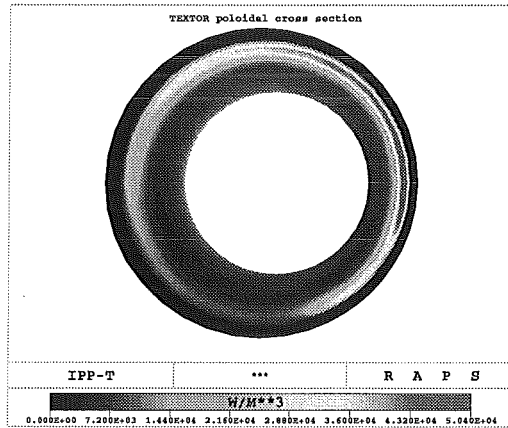


Abbildung 3.24: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das Hintergrundplasma OH-1. Links: Gesamte Strahlungsleistungsdichte der Neonverunreinigungen in W/m^3 . Rechts: Linienintegrierte Strahlungsleistungsdichte für die Bolometersichtlinien. $\star$: Sichtlinien 1-9, $+$: Sichtlinien 10-17, Δ : Sichtlinien 18-25. Oben: Berücksichtigung des gesamten Verunreinigungstransports. Unten: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift. Für jeden Fall ist außerdem die Gesamtstrahlung P_{rad} angegeben.

Neon Radiation

$$P_{\text{rad}} = 53459 \text{ W}$$



$$P_{\text{rad}} = 43924 \text{ W}$$

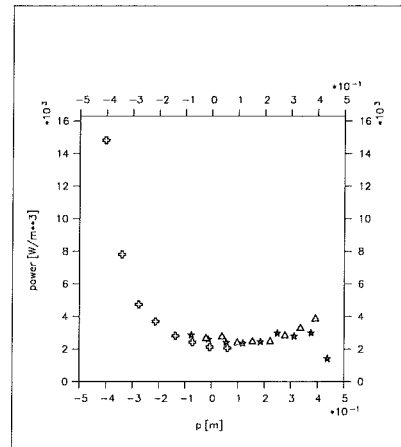
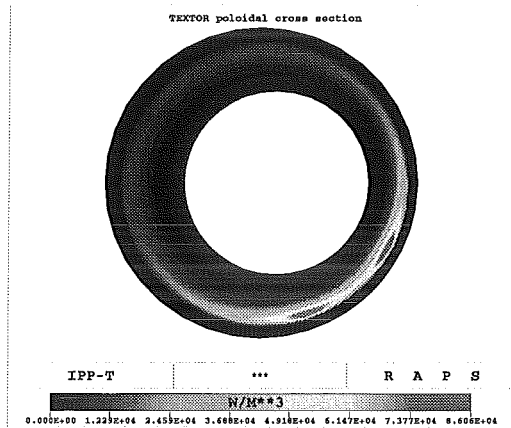


Abbildung 3.25: Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für das Hintergrundplasma OH-2. Links: Gesamte Strahlungsleistungsdichte der Neonverunreinigungen in W/m^3 . Rechts: Linienintegrierte Strahlungsleistungsdichte für die Bolometersichtlinien. $\star$: Sichtlinien 1-9, $+$: Sichtlinien 10-17, Δ : Sichtlinien 18-25. Oben: Berücksichtigung des gesamten Verunreinigungstransports. Unten: Vernachlässigung der $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift. Für jeden Fall ist außerdem die Gesamtstrahlung P_{rad} angegeben.

3.5 Bewertung der numerischen Ergebnisse

In unseren Anwendungen konnten wir als dominierende Effekte die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und die Thermokraft ausmachen. Der Spiegeleffekt erwies sich als unabdingbar in der Simulation (Eine Vernachlässigung des Spiegeleffektes ist gleichbedeutend mit der Reduktion auf eine Zylindergeometrie) und das gleiche gilt für die Einbeziehung des kompletten Coulomb-Terms, die überhaupt erst eine korrekte Berechnung der Temperaturen der Verunreinigungen ermöglichte. Damit stellen sich die von uns vorgenommenen Erweiterungen der Ansätze für die Verunreinigungsmodellierung von Stangeby, Takizuka und Shimizu (Stangeby 1992, Takizuka und Shimizu 1994), die diese Effekte nicht berücksichtigen, als entscheidend für einen realistischen Monte-Carlo-Algorithmus dar.

Zu allen vorgestellten Resultaten ist jedoch zu bemerken, daß sie nur exemplarischen Charakter besitzen und eher qualitative Tendenzen als zuverlässige quantitative Ergebnisse widerspiegeln. Dies liegt in erster Linie an zahlreichen Eingabeparametern, die wir nur durch einfache Modelle annähern, die jedoch, wie gezeigt wurde, entscheidenden Einfluß auf die Rechnungen hatten.

So sehen wir die verwendeten Quellverteilungen für Kohlenstoff – und insbesondere für Neon – als nur grob genähert an. Die im Vergleich mit dem Experiment auffällig niedrigen Werte für die Gesamtstrahlung von Kohlenstoff in unseren Simulationen führen wir auf einen unkorrekten Normierungsfaktor für die Quellstärke zurück. Diese Quellen sollten in zukünftigen Anwendungen durch eine zuverlässigere Rechnung (zum Beispiel mit dem Neutralgas-Code EIRENE (Reiter 1992)) ermittelt werden.

Auch entstammen die verwendeten Parameter für die Hintergrundplasmen des Abschnitts 3.3 nicht einer echt zweidimensionalen Modellierung, sondern geben nur Tendenzen realistischerer Hintergrundprofile wieder. Dabei scheint zum Beispiel der Temperaturgradient der Hintergrundionen in der Nähe der Limiterkanten stark unterschätzt zu werden, und die für experimentelle Szenarien sehr starke Thermokraft spielt für diese Hintergrundplasmen keine große Rolle mehr.

Ein weiterer Parameter, den wir möglicherweise zu ungenau näherten, ist das elektrische Feld. Speziell für das radiale elektrische Feld sollte in Zukunft ein präziseres Modell die Gleichung (3.20) ersetzen, da dieser Ansatz zu starken Diskrepanzen zwischen den rechnerischen und experimentellen Ergebnissen führt.

Die angesprochenen Probleme, die zu Unsicherheiten bei den quantitativen Resultaten führen, sind aber externer Natur, in dem Sinne, daß sie nicht in unserem Code DORIS implementiert sind, sondern durch Eingabeparameter bedingt werden. Die Lösung dieser Probleme lag außerhalb der Zielsetzung dieser Arbeit. Nichtsdestotrotz geben unsere Simulationen in korrekter Weise experimentelle Befunde wieder, wie die fehlende Thermalisierung der Verunreinigungen in niedrigen Ionisationsstufen, eine starke Lokalisierung der Verunreinigungsstrahlung

in der Nähe des ALT-Limiters in TEXTOR sowie die Tendenz zur Ausbildung eines strahlenden Gürtels im Falle von Neon-Verunreinigungen.

Zusammenfassung

Hintergrund und Problemstellung

Ziel dieser Arbeit war die Erweiterung bzw. Ergänzung des bereits seit Jahren mit Erfolg eingesetzten Code-Systems B2-EIRENE, welches zur numerischen Modellierung von Plasmen in realen Tokamakkonfigurationen eingesetzt wird. Dieses Code-System basiert auf einer fluidtheoretischen Modellierung der geladenen Teilchen im Plasma, die mit einer kinetischen Beschreibung der neutralen Teilchen kombiniert wird.

Das verstärkte Interesse am Transportverhalten von Verunreinigungen im Zusammenhang mit ihrem gezielten Einsatz bei der Randschichtkühlung im Tokamak warf aber die Frage auf, ob die, infolge schneller Ionisation, oftmals sehr kurzlebigen Verunreinigungen in niedrigen Ladungsstufen durch magnetohydrodynamische Modelle adäquat beschrieben werden. Denn diese Verunreinigungsspezies gehorchen nicht einfachen (oder nur leicht gestörten) Maxwell-Verteilungen im Geschwindigkeitsraum und thermalisieren auch nicht mit dem Hauptplasma, so daß die Voraussetzungen der fluidtheoretischen Ansätze nicht erfüllt werden.

Um diese Unsicherheiten in der Modellierung bezüglich des Verunreinigungstransports zu beseitigen, wurde beschlossen, ein Hybrid-Modell zu nutzen, in dem die geladenen Teilchen des Hauptplasmas weiterhin mit Hilfe magnetohydrodynamischer Methoden erfaßt werden, während die Verunreinigungsionen durch Verwendung kinetischer Modelle beschrieben werden. Zur Realisierung dieses Konzepts sollte der Monte-Carlo-Code DIVIMP von P. C. Stangeby für die Modellierung der Verunreinigungen eingesetzt und an den B2-EIRENE-Code gekoppelt werden.

Die im Rahmen dieser Arbeit vorgenommene Analyse dieses Codes hat gezeigt, daß das zugrundeliegende Modell für den Verunreinigungstransport nicht mit der Fluidbeschreibung des B2-EIRENE-Codes für das Hauptplasma kompatibel ist. Es beruht darüber hinaus auf verschiedenen ad-hoc-Annahmen, die der beabsichtigten rein kinetischen Beschreibung der Verunreinigungen widersprechen. Außerdem zeigten sich diverse Möglichkeiten zur Komplettierung des Modells um zum Teil wesentliche physikalische Effekte.

Es ergab sich somit die Notwendigkeit, ein neues Modell zu formulieren, das ge-

eignet ist, eine Grundlage für die beabsichtigten Monte-Carlo-Simulationen der Verunreinigungen zu liefern, die sich konsistent in das Hybrid-Modell für das Gesamtplasma einfügt. Außerdem mußte ein neuer Code entwickelt werden, der im Zusammenspiel mit B2-EIRENE numerische Rechnungen in realistischen Tokamakgeometrien, d. h. zweidimensionalen Poloidalschnitten in axialsymmetrischen Plasmakonfigurationen, zuläßt.

Ergebnisse

Das neue Transportmodell und der hierauf entwickelte Code DORIS werden in dieser Arbeit vorgestellt. Das theoretische Modell basiert auf einer driftkinetischen Beschreibung des Verunreinigungstransports für Teilchen in der Testteilchennäherung, die mit einem stationären fluidähnlichen Hauptplasma über Coulomb-Kräfte in Wechselwirkung stehen. Die Teilchen bewegen sich gemäß der Drift-Näherung in einer statischen toroidalen Magnetfeldkonfiguration, wobei sie infolge von Stößen mit den Elektronen des Hauptplasmas Ionisations- und Rekombinationsprozesse erleiden. Zudem werden Wechselwirkungen mit den Wandmaterialien des Tokamakgefäßes berücksichtigt, die zur Absorption der Teilchen und physikalischer Zerstäubung der Wände führen können.

Der Code DORIS verwendet ein Monte-Carlo-Verfahren zur sukzessiven Konstruktion der Trajektorien der Verunreinigungen, die eine numerische Repräsentation der Lösung der driftkinetischen Modellgleichungen liefert. Dieses Verfahren wurde gewählt, da es sich durch Robustheit und Flexibilität bezüglich komplizierter Rechengometrien und zu berücksichtigender Randbedingungen auszeichnet.

In Kapitel 1 wurde ausgehend von einem Satz gekoppelter Fokker-Planck-Gleichungen für alle Teilchenspezies im Plasma durch Einführung des Testteilchenmodells für die Verunreinigungen eine einzelne lineare Fokker-Planck-Gleichung zur Beschreibung des Transports dieser Spezies separiert.

Durch die Annahme von Maxwell-Verteilungen mit kleiner Störung für die Hauptplasmateilchen wird die kinetische Gleichung für die Verunreinigungen vollständig festgelegt und eine konsistente Anknüpfung an das fluidtheoretische Modell des B2-EIRENE-Codes für das Hauptplasma erreicht.

Um die Effizienz des numerischen Algorithmus zu steigern, wurde eine driftkinetische Näherung für die Fokker-Planck-Gleichung für die Verunreinigungen vorgenommen.

Dabei wird der Coulomb-Term direkt transformiert, wobei von der Annahme Gebrauch gemacht wurde, daß die Inhomogenitäten der makroskopischen Parameter des Hauptplasmas entlang der magnetischen Feldlinien die Coulomb-Streuung der Verunreinigungen dominieren.

Die Einbeziehung einer Störung in die angenommene Verteilung der Teilchen des

Hauptplasmas führte zu neuen Ausdrücken für die Drift- und Diffusionskoeffizienten des Coulomb-Terms, welche die Inhomogenitäten in den Parametern des Hauptplasmas berücksichtigen. Diese erweiterten Drift- und Diffusionskoeffizienten stellen die korrekte Formulierung der Coulomb-Streuung in einer durchgehend kinetischen Beschreibung des Verunreinigungstransports dar.

Im Gegensatz zu bisher verwendeten Näherungen für die Coulomb-Streuung von Verunreinigungen am Hauptplasma gewährleistet der hier abgeleitete Coulomb-Term die korrekte Thermalisierung mit dem Hauptplasma und kommt ohne die Verwendung von fluidtheoretischen Approximationen für die Streuung an den Inhomogenitäten in der Verteilung des Hauptplasmas aus. Diese Approximationen bedingten in den bisherigen Modellen für einzelne Fälle Fehler von mehreren Größenordnungen in berechneten Dichte- und Energieprofilen der Verunreinigungen.

Für die Transformation des Liouville-Terms wurden Resultate einer Standardprozedur zur Mittelung über den Gyrationwinkel der helikalen Teilchenbahnen entlang der Magnetfeldlinien genutzt. Hierbei werden Drift-Effekte wie die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift, die ∇B -Drift, die Krümmungsdrift und der Spiegeleffekt in das Modell eingeführt, die in bisherigen Modellen fehlten. Es zeigte sich, daß die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift für typische Bedingungen in Tokamaks von bedeutender Größenordnung sein kann und damit einen nicht zu vernachlässigenden Effekt darstellt. Auch erwies sich der Spiegeleffekt als wichtig in der korrekten Simulation des Transports der Verunreinigungen in toroidalen Magnetfeldkonfigurationen. Seine Vernachlässigung bedeutet die Reduktion des Modells auf eine Zylinder-Geometrie, was zu erheblichen Unterschieden der Verunreinigungsdichten an der Hochfeldseite in einem Tokamak mit großem Aspekt-Verhältnis führt. Die ∇B -Drift und die Krümmungsdrift stellten in den in dieser Arbeit angestellten Untersuchungen Effekte zweiter Ordnung dar, wurden jedoch aus Gründen der Vollständigkeit und Allgemeinheit des Modells mitberücksichtigt.

In Kapitel 2 wurde der Zusammenhang zwischen kinetischen Gleichungen der Plasmaphysik und Grundgleichungen der Theorie stochastischer Prozesse dargestellt. Es wurde gezeigt, daß Fokker-Planck-Gleichungen und Master-Gleichungen speziellen stochastischen Prozessen entsprechen und eine numerische Simulation dieser Prozesse einer Lösung der korrespondierenden Gleichungstypen äquivalent ist.

Da kinetische Gleichungen oftmals die Form von Fokker-Planck-Gleichungen und/oder Master-Gleichungen besitzen, lassen sich Monte-Carlo-Simulationen spezieller Diffusions- und Sprungprozesse zur Lösung einer großen Klasse physikalischer Modell-Gleichungen einsetzen. Numerische Anwendungen an analytisch lösbaren Beispielen von Transportproblemen illustrierten den Aufbau solcher Lösungsalgorithmen und demonstrierten die Leistungsfähigkeit der relativ

einfach zu realisierenden Monte-Carlo-Methode, die sich insbesondere für mehrdimensionale Probleme auf kompliziert berandeten Rechengebieten eignet. Das Verfahren weist keinerlei Konvergenzprobleme auf und läßt im Prinzip die beliebig genaue Berechnung von physikalischen Verteilungsfunktionen zu, wobei jedoch die erforderliche Rechenzeit aufgrund der statistischen Natur der Methode sehr schnell ansteigt.

Es wurde gezeigt, auf welche Weise sich der zunächst für die reine Transportsimulation vorgestellte Lösungsalgorithmus durch die Einbeziehung von Teilchenumwandlungsprozessen und Teilchenquellen bzw. -senken erweitern läßt. Damit wurde das Monte-Carlo-Verfahren anwendbar für die im ersten Kapitel abgeleiteten driftkinetischen Modell-Gleichungen für die Verunreinigungen.

In Kapitel 3 wurden exemplarische Anwendungen des Codes DORIS für Szenarien im Tokamak TEXTOR vorgestellt. Dieser Code erlaubt die Berechnung von Dichte-, Energie- und Strahlungsprofilen sowie weiterer charakteristischer Parameter, die sich aus der Verteilungsfunktion der Verunreinigungen im Phasenraum ableiten lassen, für den zweidimensionalen Poloidalschnitt eines axial-symmetrischen Tokamakplasmas. Benutzt werden hierzu das Transportmodell und der Monte-Carlo-Algorithmus, wie sie in den ersten beiden Kapiteln dargestellt wurden. Für die Simulationsrechnungen benötigt der Code Vorgaben über die Magnetfeldstruktur, über die atomaren Daten, welche die Ionisations-, Rekombinations- und Zerstäubungsprozesse bestimmen, und über makroskopische Parameter des Hauptplasmas (Dichte, Temperatur, Strömungsgeschwindigkeit etc.).

Es wurden einfache Näherungen für das Magnetfeld im Tokamak TEXTOR und die atomaren Daten erläutert, die in den in dieser Arbeit realisierten Rechnungen Verwendung fanden. Für die Parameter des Hauptplasmas wurden sowohl Ergebnisse numerischer Modellierungen mit dem B2-EIRENE-Code wie auch Profile, die mit einem semi-empirischen eindimensionalen Modell berechnet wurden, verwendet.

Für drei verschiedene TEXTOR-Randschichtplasmen, die aus einer B2-EIRENE-Modellierung stammen, wurde die Thermalisierung von Kohlenstoff untersucht, der durch physikalische Zerstäubung des Limiters in TEXTOR in das Plasma gelangt. Die Resultate bestätigten die Notwendigkeit einer kinetischen Beschreibung der niedrigen Ladungszustände dieser Verunreinigung, da die Annahme einer Thermalisierung, wie sie in der Fluid-Theorie gemacht wird, erst für die Ladungsstufen $Z \geq 4$ erfüllt ist. Dieses Resultat steht in Übereinstimmung mit experimentellen Beobachtungen für die Temperaturen der verschiedenen Ionenspezies von Kohlenstoff.

Für ein weiteres TEXTOR-Randschichtplasma, das ebenfalls mit Hilfe des B2-EIRENE-Codes modelliert wurde, wurde zum einen die Strahlungscharakteristik

von Limiter-Kohlenstoff untersucht, und zum anderen ein Vergleich der unterschiedlichen Ansätze zur Beschreibung der für diese Verunreinigungen wirksamen Thermokräfte in dem hier verwendeten Modell und dem des DIVIMP-Codes angestellt.

Die Ergebnisse der Strahlungsprofile des Kohlenstoffs zeigten qualitativ eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit bolometrisch an TEXTOR ermittelten experimentellen Resultaten. Als die den Transport dominierenden Effekte konnten die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift, die Thermokraft und das parallele elektrische Feld ausgemacht werden.

Der Vergleich des neuen driftkinetischen Modells für die Thermokraft mit dem Fluid-Ansatz des DIVIMP-Codes ergab lokale Unterschiede in der Dichte- und Energieverteilung der niedrig geladenen Kohlenstoff-Verunreinigungen in der Randschicht von bis zu drei Größenordnungen. Erst für die Ladungsstufen $Z \geq 4$ lieferten die unterschiedlichen Ansätze annähernd gleiche Resultate für die Randschicht des Plasmas, womit sich auch hier wieder die Wichtigkeit der vorgestellten durchgehend kinetischen Beschreibung bestätigt. Erst die höheren Ladungsstufen lassen sich zufriedenstellend mit einem Fluidmodell beschreiben. Die geänderten Quellverteilungen für die höheren Ladungsstufen, die sich durch die unterschiedlichen Dichteverteilungen der unteren Ionisationszustände ergibt, zog aber auch signifikante Effekte für die Verteilung der höheren Ladungsstufen innerhalb der Separatrix nach sich, so daß sich der Fehler der Fluid-Approximation nicht nur auf die niedrigen Ladungsstufen allein beschränkt.

Weitere Rechnungen für TEXTOR wurden mit Hilfe von Ergebnissen eines semi-empirischen Modells gemacht, wobei das Augenmerk hauptsächlich der Untersuchung des Effekts der starken $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift galt, aber auch zwei Szenarien mit unterschiedlich hohen Dichten und Temperaturen des Hauptplasmas am Limiter gegenüber gestellt wurden.

Es wurde wiederum Limiter-Kohlenstoff und in ersten Anwendungen auch Neon untersucht, wobei für Neon zunächst eine Quellverteilung angenommen wurde, die der des Kohlenstoffs entspricht.

Erneut konnte die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift als wichtiger Effekt identifiziert werden, der in zukünftigen Anwendungen sorgfältig modelliert werden muß, da die Resultate diesem Effekt gegenüber äußerst sensitiv waren, das theoretische Verständnis des radialen elektrischen Feldes jedoch noch nicht vollständig ausgereift ist.

Die unterschiedlichen Temperatur- und Dichteverhältnisse in den zwei betrachteten Hauptplasmaprofilen bewirkten in erster Linie eine Änderung der Ionisations- und Rekombinationswahrscheinlichkeiten der Verunreinigungen, welche die Eindringtiefe der niedrigen Ladungsstufen in das Plasma bestimmen und damit auch die Gesamtstrahlung der Verunreinigungen, die vornehmlich von diesen Ladungsstufen beeinflußt wird.

Als wesentlicher Unterschied zwischen den Verunreinigungen Kohlenstoff und Ne-

on erwies sich, daß die Strahlungsprofile des Neons weit weniger sensitiv sind gegenüber Details der Plasmaprofile am Limiter, als die des Kohlenstoff, da bei Neon die Strahlungscharakteristik stärker von Ionen mittlerer Ladungsstufe als von niedrigionisierten, wie beim Kohlenstoff, bestimmt werden. Die Dominanz der mittleren Ladungszustände bei der Strahlung spiegelte sich in den rechnerischen Ergebnissen außerdem in der Tendenz des Neon wider, einen strahlenden Gürtel am Plasmarand auszubilden, wie er auch experimentell beobachtet wurde und in der Randschichtkühlung angestrebt wird.

Ausblick

Die Struktur des Codes DORIS wurde so gestaltet, daß er als Unteroutine an bestehende Code-Systeme zur Berechnung von Magnetfeldstrukturen und Hauptplasma-Parametern angekoppelt werden kann.

Momentan befindet sich diese Kopplung noch in der Entwicklung und läßt lediglich die Verwendung von anderweitig gewonnenen Hauptplasma-Parametern im Code DORIS zu. Zukünftig soll aber auch eine Rückkopplung der mit DORIS gewonnenen Resultate an Codes zur Berechnung der Hauptplasma-Parameter (d. h. B2-EIRENE) stattfinden, welche die Resultate für die Verteilung der Verunreinigungen als zusätzliche Teilchen-, Impuls- und Energiequellen berücksichtigen und daraufhin ein modifiziertes Hintergrundplasma liefern sollen, das wiederum als Eingabe für DORIS dient. Durch eine Fortführung dieser Kopplung wird eine iterative Lösung für ein nicht-lineares Modell für das gesamte Plasma im Tokamak angestrebt.

Um dabei eine größere Zuverlässigkeit der mit DORIS ermittelten Ergebnisse zu gewährleisten ist es notwendig, Unsicherheiten in Eingabeparametern, wie dem elektrischen Feld und der Quellverteilung der Verunreinigungen, durch Verwendung verbesserter Modelle zu vermeiden.

Durch die Einbeziehung diverser driftkinetischer Effekte erweist sich das hier erarbeitete Modell zudem als geeignetes Werkzeug, um erste Aufschlüsse zu erhalten über den Transport von Verunreinigungen (oder auch geladenen Teilchen im allgemeinen) in gestörten Magnetfeldkonfigurationen, wie sie zukünftig im Rahmen des DED-Projekts (Dynamic Ergodic Divertor) am Tokamak TEXTOR realisiert werden sollen.

Aufgrund seiner Flexibilität kann der vorgestellte Monte-Carlo-Algorithmus auch im Studium dreidimensionaler Magnetfeldstrukturen (Stellarator), in der Untersuchung von Gyro-Effekten (Verzicht auf die driftkinetische Approximation, Beschränkung auf kleine Raumbereiche) und für (räumlich) nulldimensionale Relaxationsstudien (Thermalisierung im Geschwindigkeitsraum) Einsatz finden.

Anhang A

Berechnung der Integrale $I^1, I^2, I_i^3, I_i^4, I_{ik}^5, I_{ik}^6$

Mit Hilfe der Beziehungen (siehe (1.28), (1.30), (1.31))

$$\begin{aligned} f_b^0 &= \frac{\alpha^3}{\pi^{3/2}} e^{-\chi^2} \quad ; \quad d\mathbf{v} = \frac{d\boldsymbol{\chi}}{\alpha^3} \quad ; \quad |\mathbf{v} - \mathbf{v}_0| = \frac{1}{\alpha} |\boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{\omega}| \quad ; \quad \boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\chi}_0 - \boldsymbol{\chi}_b \\ \boldsymbol{\chi} &= \alpha(\mathbf{v} - \mathbf{v}_b) \quad ; \quad \boldsymbol{\chi}_0 = \alpha\mathbf{v}_0 \quad ; \quad \boldsymbol{\chi}_b = \alpha\mathbf{v}_b \end{aligned} \tag{A.1}$$

schreiben sich die Integrale (1.34) als

$$\begin{aligned} I^1(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} \int |\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\omega}|^{-1} e^{-\chi^2} d\boldsymbol{\chi} \\ I^2(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} \int |\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\omega}| e^{-\chi^2} d\boldsymbol{\chi} \\ I_i^3(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{5}} \int \chi_i (2\chi^2 - 5) |\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\omega}|^{-1} e^{-\chi^2} d\boldsymbol{\chi} \\ I_i^4(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{5}} \int \chi_i (2\chi^2 - 5) |\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\omega}| e^{-\chi^2} d\boldsymbol{\chi} \\ I_{ik}^5(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} \sqrt{2} \int \left(\chi_i \chi_k - \frac{1}{3} \chi^2 \delta_{ik} \right) |\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\omega}|^{-1} e^{-\chi^2} d\boldsymbol{\chi} \\ I_{ik}^6(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} \sqrt{2} \int \left(\chi_i \chi_k - \frac{1}{3} \chi^2 \delta_{ik} \right) |\boldsymbol{\chi} - \boldsymbol{\omega}| e^{-\chi^2} d\boldsymbol{\chi} . \end{aligned} \tag{A.2}$$

Es wird nun die Substitution

$$\boldsymbol{\chi} \rightarrow \boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{\omega} \tag{A.3}$$

und außerdem eine Koordinatentransformation vorgenommen

$$(\chi + \omega)_i = \sum_l t_{il} (\chi'_l + \omega'_l) \quad , \quad (\text{A.4})$$

wobei die orthogonale Transformationsmatrix t_{ik}^{-1} die Komponenten von χ und ω in ein System überführt, in dem eine Achse parallel zum Vektor ω liegt:

$$\omega'_i = \omega \delta_{i1} = \sum_l t_{il}^{-1} \omega_l \quad . \quad (\text{A.5})$$

Die irreduziblen tensoriellen Hermite-Polynome (1.30) transformieren dann wie

$$\begin{aligned} (\chi + \omega)_i (2(\chi + \omega)^2 - 5) &= \sum_l t_{il} (\chi'_l + \omega'_l) (2 \sum_n (\chi'_n + \omega'_n)^2 - 5) \\ (\chi + \omega)_i (\chi + \omega)_k - \frac{1}{3} (\chi + \omega)^2 \delta_{ik} &= \\ \sum_{l,m} t_{il} t_{mk}^{-1} \left((\chi'_l + \omega'_l) (\chi'_m + \omega'_m) - \frac{1}{3} \sum_n (\chi'_n + \omega'_n)^2 \delta_{lm} \right) & . \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Setzt man diese Ausdrücke in die Integrale (A.2) ein und geht über zu Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} \chi'_1 + \omega'_1 &= \chi \cos \vartheta + \omega \\ \chi'_2 + \omega'_2 &= \chi \sin \vartheta \cos \varphi \\ \chi'_3 + \omega'_3 &= \chi \sin \vartheta \sin \varphi \\ d\chi' &= \chi^2 \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \, d\chi \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

so zeigt sich, daß diverse Terme bei der Integration über φ verschwinden. Letztendlich lassen sich alle Integrale I^1 bis I_{ik}^6 durch Integrale des folgenden Typs ausdrücken (n, m und l sind ganze Zahlen mit $n, m \geq 0$ und $l = 0, \pm 1$)

$$L_l^{2nm} = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\chi \sin \vartheta \cos \varphi)^{2n} (\chi \cos \vartheta + \omega)^m \chi^l e^{-(\chi^2 + 2\chi \omega \cos \vartheta + \omega^2)} \chi^2 \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi \, d\chi \quad . \quad (\text{A.8})$$

Es gilt

$$\begin{aligned}
I^1(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} L_{-1}^{00} \\
I^2(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} L_{+1}^{00} \\
I_i^3(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{5}} t_{i1} \left(4 L_{-1}^{21} + 2 L_{-1}^{03} - 5 L_{-1}^{01} \right) \\
I_i^4(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{5}} t_{i1} \left(4 L_{+1}^{21} + 2 L_{+1}^{03} - 5 L_{+1}^{01} \right) \\
I_{ik}^5(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} \sqrt{2} \left(\frac{2}{3} t_{i1} t_{1k}^{-1} \left(L_{-1}^{02} - L_{-1}^{20} \right) - \frac{1}{3} t_{i2} t_{2k}^{-1} \left(L_{-1}^{02} - L_{-1}^{20} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{3} t_{i3} t_{3k}^{-1} \left(L_{-1}^{02} - L_{-1}^{20} \right) \right) \\
I_{ik}^6(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} \sqrt{2} \left(\frac{2}{3} t_{i1} t_{1k}^{-1} \left(L_{+1}^{02} - L_{+1}^{20} \right) - \frac{1}{3} t_{i2} t_{2k}^{-1} \left(L_{+1}^{02} - L_{+1}^{20} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{3} t_{i3} t_{3k}^{-1} \left(L_{+1}^{02} - L_{+1}^{20} \right) \right) .
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Aufgrund der Definition von t_{ik} (siehe (A.5)) gilt

$$t_{i1} = \frac{\omega_i}{\omega} \quad ; \quad 2 t_{i1} t_{1k}^{-1} - t_{i2} t_{2k}^{-1} - t_{i3} t_{3k}^{-1} = 3 \frac{\omega_i \omega_k}{\omega} - \delta_{ik} \tag{A.10}$$

und somit wird aus den Integralen I_i^3 , I_i^4 , I_{ik}^5 und I_{ik}^6

$$\begin{aligned}
I_i^3(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{\omega_i}{\omega} \left(4 L_{-1}^{21} + 2 L_{-1}^{03} - 5 L_{-1}^{01} \right) \\
I_i^4(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{\omega_i}{\omega} \left(4 L_{+1}^{21} + 2 L_{+1}^{03} - 5 L_{+1}^{01} \right) \\
I_{ik}^5(\mathbf{v}_0) &= \frac{\alpha}{\pi^{3/2}} \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\delta_{ik} - 3 \frac{\omega_i \omega_k}{\omega} \right) \left(L_{-1}^{20} - L_{-1}^{02} \right) \\
I_{ik}^6(\mathbf{v}_0) &= \frac{1}{\alpha\pi^{3/2}} \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\delta_{ik} - 3 \frac{\omega_i \omega_k}{\omega} \right) \left(L_{+1}^{20} - L_{+1}^{02} \right) .
\end{aligned} \tag{A.11}$$

Das Integral L_l^{2nm} läßt sich folgendermaßen auswerten:

$$\begin{aligned}
L_l^{2n m} &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\chi \sin\vartheta \cos\varphi)^{2n} (\chi \cos\vartheta + \omega)^m \chi^l e^{-(\chi^2 + 2\chi\omega \cos\vartheta + \omega^2)} \times \\
&\quad \times \chi^2 \sin\vartheta d\vartheta d\varphi d\chi \\
&= \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \chi^{2n+m-i+l+2} \sin^{2n}\vartheta \cos^{m-i}\vartheta \cos^{2n}\varphi \omega^i \times \\
&\quad \times e^{-(\chi^2 + 2\chi\omega \cos\vartheta + \omega^2)} \sin\vartheta d\vartheta d\varphi d\chi \\
&= \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_{-1}^+ \chi^{2n+m-i+l+2} (1 - \cos^2\vartheta)^n \cos^{m-i}\vartheta \cos^{2n}\varphi \omega^i \times \\
&\quad \times e^{-(\chi^2 + 2\chi\omega \cos\vartheta + \omega^2)} d\cos\vartheta d\varphi d\chi \\
&= 2\pi \left(\prod_{k=1}^n \frac{2k-1}{2k} \right) \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \int_0^\infty \int_{-1}^+ \chi^{2n+m+l+2-i} (1 - \cos^2\vartheta)^n \times \\
&\quad \times \cos^{m-i}\vartheta \omega^i e^{-(\chi^2 + 2\chi\omega \cos\vartheta + \omega^2)} d\cos\vartheta d\chi \quad .
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Im letzten Schritt wurde die Formel

$$\int_0^{2\pi} \cos^{2n}\varphi d\varphi = \left(\prod_{k=1}^n \frac{2k-1}{2k} \right) 2\pi \tag{A.13}$$

benutzt, die für $n \geq 0$ gültig ist (Beweis durch vollständige Induktion).
Auswertung des Terms $(1 - \cos^2\vartheta)^n$ liefert

$$\begin{aligned}
L_l^{2n m} &= 2\pi \left(\prod_{k=1}^n \frac{2k-1}{2k} \right) \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \omega^i \sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} \times \\
&\quad \times \int_0^\infty \int_{-1}^+ \chi^{2n+m+l+2-i} \cos^{2j+m-i}\vartheta e^{-(\chi^2 + 2\chi\omega \cos\vartheta + \omega^2)} d\cos\vartheta d\chi \quad .
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Und gemäß der Formel

$$\int x^n e^{-\beta x} dx = - \sum_{i=0}^n \frac{n!}{(n-i)!} \frac{x^{n-i}}{\beta^{i+1}} e^{-\beta x} \quad , \tag{A.15}$$

die für $n \geq 0$ gilt (Beweis durch vollständige Induktion), folgt aus der Integration über $\cos\vartheta$

$$\begin{aligned}
L_l^{2nm} = & -2\pi \left(\prod_{k=1}^n \frac{2k-1}{2k} \right) \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \omega^i \sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} \times \\
& \times \sum_{p=0}^{2j+m-i} \frac{(2j+m-i)!}{(2j+m-i-p)!} \int_0^\infty \chi^{2n+m+l+2-i-p-1} (2\omega)^{-p-1} e^{-(\chi^2+\omega^2)} \times \\
& \times \left(e^{-2\chi\omega} - (-1)^{2j+m-i-p} e^{+2\chi\omega} \right) d\chi \quad .
\end{aligned} \tag{A.16}$$

Variablensubstitution $\chi \rightarrow \chi \pm \omega$ liefert

$$\begin{aligned}
L_l^{2nm} = & -2\pi \left(\prod_{k=1}^n \frac{2k-1}{2k} \right) \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \omega^i \sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} \times \\
& \times \sum_{p=0}^{2j+m-i} (2\omega)^{-p-1} \frac{(2j+m-i)!}{(2j+m-i-p)!} \times \\
& \times \left(\int_\omega^\infty (\chi - \omega)^{2n+m+l+1-i-p} e^{-\chi^2} d\chi \right. \\
& \left. - (-1)^{2j+m-i-p} \int_{-\omega}^\infty (\chi + \omega)^{2n+m+l+1-i-p} e^{-\chi^2} d\chi \right)
\end{aligned} \tag{A.17}$$

und damit

$$\begin{aligned}
L_l^{2nm} = & 2\pi \left(\prod_{k=1}^n \frac{2k-1}{2k} \right) \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} \omega^i \sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} \times \\
& \times \sum_{p=0}^{2j+m-i} (2\omega)^{-p-1} \frac{(2j+m-i)!}{(2j+m-i-p)!} \times \\
& \times \left(\sum_{s=0}^q (-1)^s \binom{q}{s} \omega^s \int_\omega^\infty \chi^{q-s} e^{-\chi^2} d\chi \right. \\
& \left. - (-1)^{2j+m-i-p} \sum_{s=0}^q \binom{q}{s} \omega^s \int_{-\omega}^\infty \chi^{q-s} e^{-\chi^2} d\chi \right) \quad ,
\end{aligned} \tag{A.18}$$

wobei $q = 2n + m + l + 1 - i - p$.

Mit Hilfe der Abkürzungen

$$\begin{aligned}
Q_{ijps}^{nml} &= -2\pi \left(\prod_{k=1}^n \frac{2k-1}{2k} \right) \binom{m}{i} \binom{n}{j} \binom{q}{s} \frac{(2j+m-i)!}{(2j+m-i-p)!} 2^{-p-1} \omega^{i-p-1+s} \\
K_{q-s}^+ &= \int_{\omega}^{\infty} \chi^{q-s} e^{-\chi^2} d\chi \\
K_{q-s}^- &= \int_{-\omega}^{\infty} \chi^{q-s} e^{-\chi^2} d\chi
\end{aligned} \tag{A.19}$$

läßt sich schreiben

$$L_l^{2nm} = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{p=0}^{2j+m-i} \sum_{s=0}^q Q_{ijps}^{nml} \left((-1)^{j+s} K_{q-s}^+ - (-1)^{j+m-i-p} K_{q-s}^- \right) \tag{A.20}$$

mit $q = 2n + m + l + 1 - i - p$.

Die Integrale K_{q-s}^+ und K_{q-s}^- lassen sich mit Hilfe der Formeln

$$\begin{aligned}
\int \chi^{2n} e^{-\alpha^2 \chi^2} d\chi &= -\frac{1}{2n+1} \sum_{i=0}^{n-1} \left(\prod_{k=0}^i \frac{2n+1-2k}{2\alpha^2} \right) \chi^{2n-1-2i} e^{-\alpha^2 \chi^2} \\
&\quad + \left(\prod_{k=0}^{n-1} \frac{2n-1-2k}{2\alpha^2} \right) \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \Phi(\alpha\chi)
\end{aligned} \tag{A.21}$$

und

$$\begin{aligned}
\int \chi^{2n+1} e^{-\alpha^2 \chi^2} d\chi &= -\frac{1}{2n+2} \sum_{i=0}^{n-1} \left(\prod_{k=0}^i \frac{2n+2-2k}{2\alpha^2} \right) \chi^{2n-2i} e^{-\alpha^2 \chi^2} \\
&\quad - \left(\prod_{k=0}^{n-1} \frac{2n-2k}{2\alpha^2} \right) \frac{1}{2\alpha^2} e^{-\alpha^2 \chi^2}
\end{aligned} \tag{A.22}$$

bestimmen. Sie sind gültig für $n \geq 0$ (Beweis durch vollständige Induktion). $\Phi(\chi)$ ist die Fehler-Funktion (siehe (1.36)).

Die Formeln (A.19) - (A.22) wurden von uns zur Berechnung der Integrale (1.34) verwendet.

Anhang B

Die Potentialfunktionen $\phi_0, \phi_1, \phi_2, \psi_0, \psi_1, \psi_2$

Die Potentialfunktionen der Gleichung (1.44) lauten

$$\begin{aligned}\phi_0(\chi) &= \frac{\alpha}{\chi} \Phi(\chi) \\ \phi_1(\chi) &= \alpha \chi \Phi'(\chi) \\ \phi_2(\chi) &= \left(\frac{2\alpha}{3} + \frac{\alpha}{\chi^2} \right) \Phi'(\chi) - \frac{\alpha}{\chi^3} \Phi(\chi) \\ \psi_0(\chi) &= \frac{1}{2\alpha} \Phi'(\chi) + \left(\frac{1}{2\alpha\chi} + \frac{\chi}{\alpha} \right) \Phi(\chi) \\ \psi_1(\chi) &= \frac{1}{2\alpha\chi} \Phi'(\chi) - \frac{1}{2\alpha\chi^2} \Phi(\chi) \\ \psi_2(\chi) &= \frac{1}{2\alpha\chi^2} \Phi'(\chi) + \left(\frac{1}{3\alpha\chi} - \frac{1}{2\alpha\chi^3} \right) \Phi(\chi) \quad .\end{aligned}\tag{B.1}$$

Die für uns wichtigen Ableitungen dieser Funktionen nach χ sind

$$\begin{aligned}
\phi'_0(\chi) &= \frac{\alpha}{\chi} \Phi'(\chi) - \frac{\alpha}{\chi^2} \Phi(\chi) \\
\phi'_1(\chi) &= (\alpha - 2\alpha\chi^2) \Phi'(\chi) \\
\phi'_2(\chi) &= -\left(\frac{2\alpha\chi}{3} + \frac{2\alpha}{\chi} + \frac{3\alpha}{\chi^3}\right) \Phi'(\chi) + \frac{3\alpha}{\chi^4} \Phi(\chi) \\
\psi'_0(\chi) &= \frac{1}{2\alpha\chi} \Phi'(\chi) + \left(\frac{1}{\alpha} - \frac{1}{2\alpha\chi^2}\right) \Phi(\chi) \\
\psi'_1(\chi) &= -\left(\frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\alpha\chi^2}\right) \Phi'(\chi) + \frac{1}{\alpha\chi^3} \Phi(\chi) \\
\psi'_2(\chi) &= -\left(\frac{2}{3\alpha\chi} + \frac{3}{2\alpha\chi^3}\right) \Phi'(\chi) + \left(-\frac{1}{3\alpha\chi^2} + \frac{3}{2\alpha\chi^4}\right) \Phi(\chi) \\
\psi''_0(\chi) &= -\frac{1}{\alpha\chi^2} \Phi'(\chi) + \frac{1}{\alpha\chi^3} \Phi(\chi) \\
\psi''_1(\chi) &= \left(\frac{2\chi}{\alpha} + \frac{2}{\alpha\chi} + \frac{3}{\alpha\chi^3}\right) \Phi'(\chi) - \frac{3}{\alpha\chi^4} \Phi(\chi) \\
\psi''_2(\chi) &= \left(\frac{4}{3\alpha} + \frac{10}{3\alpha\chi^2} + \frac{6}{\alpha\chi^4}\right) \Phi'(\chi) + \left(\frac{2}{3\alpha\chi^3} - \frac{6}{\alpha\chi^5}\right) \Phi(\chi) \quad .
\end{aligned} \tag{B.2}$$

Die Ableitungen der Potentialfunktionen ϕ und ψ , die in den Gleichungen (1.49) und (1.52) auftauchen, sind gegeben durch (χ und α sind in (1.35) definiert)

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial v_{\parallel}} \\ \frac{\partial \phi}{\partial v_{\perp}} \end{pmatrix} = \frac{\alpha}{\chi} \begin{pmatrix} \chi_{\parallel} & -\chi_{\perp} \\ \chi_{\perp} & \chi_{\parallel} \end{pmatrix} (\mathcal{A}_0 + C_1 \mathcal{A}_1 + C_2 \mathcal{A}_2) \quad , \tag{B.3}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial v_{\parallel}} \\ \frac{\partial \psi}{\partial v_{\perp}} \end{pmatrix} = \frac{\alpha}{\chi} \begin{pmatrix} \chi_{\parallel} & -\chi_{\perp} \\ \chi_{\perp} & \chi_{\parallel} \end{pmatrix} (\mathcal{B}_0 + C_1 \mathcal{B}_1 + C_2 \mathcal{B}_2) \quad , \tag{B.4}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\parallel}^2} & \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} & \frac{\partial^2 \psi}{\partial v_{\perp}^2} \end{pmatrix} = \frac{\alpha^2}{\chi^2} \begin{pmatrix} \chi_{\parallel} & -\chi_{\perp} \\ \chi_{\perp} & \chi_{\parallel} \end{pmatrix} (\mathcal{C}_0 + C_1 \mathcal{C}_1 + C_2 \mathcal{C}_2) \begin{pmatrix} \chi_{\parallel} & \chi_{\perp} \\ -\chi_{\perp} & \chi_{\parallel} \end{pmatrix} . \quad (\text{B.5})$$

Dabei lauten die Vektoren $\mathcal{A}_0, \mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{B}_2$ und Matrizen $\mathcal{C}_0, \mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_0 &= \begin{pmatrix} \phi'_0(\chi) \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathcal{A}_1 = \begin{pmatrix} \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \phi'_1 \\ -\frac{\chi_{\perp}}{\chi} \frac{\phi_1}{\chi} \end{pmatrix} ; \quad \mathcal{A}_2 = \begin{pmatrix} \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \phi'_2 \\ 6 \frac{\chi_{\parallel} \chi_{\perp}}{\chi^2} \frac{\phi_2}{\chi} \end{pmatrix} \\ \mathcal{B}_0 &= \begin{pmatrix} \psi'_0(\chi) \\ 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathcal{B}_1 = \begin{pmatrix} \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \psi'_1 \\ -\frac{\chi_{\perp}}{\chi} \frac{\psi_1}{\chi} \end{pmatrix} ; \quad \mathcal{B}_2 = \begin{pmatrix} \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \psi'_2 \\ 6 \frac{\chi_{\parallel} \chi_{\perp}}{\chi^2} \frac{\psi_2}{\chi} \end{pmatrix} \\ \mathcal{C}_0 &= \begin{pmatrix} \psi''_0 & 0 \\ 0 & \frac{\psi'_0}{\chi} \end{pmatrix} \\ \mathcal{C}_1 &= \begin{pmatrix} \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \psi''_1 & -\frac{\chi_{\perp}}{\chi} \left(\frac{\psi'_1}{\chi} - \frac{\psi_1}{\chi^2} \right) \\ -\frac{\chi_{\perp}}{\chi} \left(\frac{\psi'_1}{\chi} - \frac{\psi_1}{\chi^2} \right) & \frac{\chi_{\parallel}}{\chi} \left(\frac{\psi'_1}{\chi} - \frac{\psi_1}{\chi^2} \right) \end{pmatrix} \\ \mathcal{C}_2 &= \begin{pmatrix} \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \psi''_2 & 6 \frac{\chi_{\parallel} \chi_{\perp}}{\chi^2} \left(\frac{\psi'_2}{\chi} - \frac{\psi_2}{\chi^2} \right) \\ 6 \frac{\chi_{\parallel} \chi_{\perp}}{\chi^2} \left(\frac{\psi'_2}{\chi} - \frac{\psi_2}{\chi^2} \right) & \left(1 - 3 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \frac{\psi'_2}{\chi} - 6 \left(1 - 2 \frac{\chi_{\parallel}^2}{\chi^2}\right) \frac{\psi_2}{\chi^2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Mit den Ableitungen aus den Gleichungen (B.2).

Anhang C

Sprungprozeßapproximation eines Diffusionsprozesses

In diesem Abschnitt wird gezeigt, auf welche Weise sich die Fokker-Planck-Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\mathbf{y}, t)}{\partial t} = & - \sum_i \frac{\partial}{\partial y_i} (A_i(\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t)) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_k} ((\mathbf{B}(\mathbf{y}, t) \mathbf{B}^T(\mathbf{y}, t))_{ik} p(\mathbf{y}, t)) \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

als Grenzfall der Master-Gleichung

$$\frac{\partial p(\mathbf{y}, t)}{\partial t} = \int (W_\delta(\mathbf{y}|\mathbf{z}, t) p(\mathbf{z}, t) - W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t)) d\mathbf{z} \quad (\text{C.2})$$

für $\delta \rightarrow 0$ ergibt, wenn die Bedingungen (2.26), (2.27) und (2.28), die im Abschnitt 2.3 genannt wurden, erfüllt sind.

Die Bedingungen (2.26), (2.27) und (2.28), die an die Übergangswahrscheinlichkeiten $W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t)$ der Master-Gleichung gestellt werden, ähneln denen, die im Abschnitt 2.1 zur Herleitung der Chapman-Kolmogorov-Gleichung genannt wurden ((2.9), (2.10) und (2.11)). Im folgenden orientieren wir uns deshalb an der Argumentation, wie sie Gardiner im Zusammenhang mit der Herleitung der Chapman-Kolmogorov-Gleichung benutzt hat (Gardiner 1985, Kapitel 3).

Wir betrachten eine zweimal stetig differenzierbare Funktion $f(\mathbf{y})$ und die zeitliche Änderung ihres Mittelwertes, wie sie sich aus der Master-Gleichung ergibt

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} = \int \int (f(\mathbf{z}) - f(\mathbf{y})) W_\delta(\mathbf{z}|\mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} d\mathbf{y} \quad . \quad (\text{C.3})$$

Es werden nun zwei Integrationsgebiete $|\mathbf{z} - \mathbf{y}| < \varepsilon$ und $|\mathbf{z} - \mathbf{y}| \geq \varepsilon$ mit $\varepsilon > 0$

eingeführt. In dem kleinen Bereich $|\mathbf{z} - \mathbf{y}| < \varepsilon$ wird die Funktion $f(\mathbf{z})$ nach Taylor entwickelt

$$f(\mathbf{z}) = f(\mathbf{y}) + \sum_i \frac{\partial f(\mathbf{y})}{\partial y_i} (z_i - y_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2 f(\mathbf{y})}{\partial y_i \partial y_k} (z_i - y_i)(z_k - y_k) + |\mathbf{z} - \mathbf{y}|^2 R(\mathbf{z}, \mathbf{y}) \quad . \quad (\text{C.4})$$

Für die zweimal stetig differenzierbare Funktion gelte

$$|R(\mathbf{z}, \mathbf{y})| \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad |\mathbf{z} - \mathbf{y}| \rightarrow 0 \quad . \quad (\text{C.5})$$

Einsetzen in obige Gleichung (C.3) liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int f(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} &= \int \int_{|\mathbf{z} - \mathbf{y}| > \varepsilon} (f(\mathbf{z}) - f(\mathbf{y})) W_\delta(\mathbf{z} | \mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} d\mathbf{y} \\ &\quad + \int \int_{|\mathbf{z} - \mathbf{y}| > \varepsilon} \sum_i \frac{\partial f(\mathbf{y})}{\partial y_i} (z_i - y_i) W_\delta(\mathbf{z} | \mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} d\mathbf{y} \\ &\quad + \int \int_{|\mathbf{z} - \mathbf{y}| > \varepsilon} \frac{1}{2} \sum_{i,k} \frac{\partial^2 f(\mathbf{y})}{\partial y_i \partial y_k} (z_i - y_i)(z_k - y_k) W_\delta(\mathbf{z} | \mathbf{y}, t) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{z} d\mathbf{y} \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Wegen Voraussetzung (2.26) findet sich für jedes beliebige $\varepsilon > 0$ ein δ , so daß das erste Integral verschwindet. Wegen der vorausgesetzten Existenz der Grenzwerte in den Bedingungen (2.27) und (2.28) folgt

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial t} \int f(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} &= \sum_i \int \frac{\partial f(\mathbf{y})}{\partial y_i} A_i(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \int \frac{\partial^2 f(\mathbf{y})}{\partial y_i \partial y_k} D_{ik}(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Dabei wurde von der vorausgesetzten gleichmäßigen Konvergenz Gebrauch gemacht und Grenzwertbildung und Integration vertauscht. Gleichzeitig wurde auch der Übergang $\varepsilon \rightarrow 0$ gemacht.

Abschließende partielle Integration liefert

$$\begin{aligned} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial t} \int f(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} &= - \sum_i \int f(\mathbf{y}) \frac{\partial (A_i(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t))}{\partial y_i} d\mathbf{y} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,k} \int f(\mathbf{y}) \frac{\partial^2 (D_{ik}(\mathbf{y}) p(\mathbf{y}, t))}{\partial y_i \partial y_k} d\mathbf{y} \quad , \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

wobei angenommen wurde, daß $p(\mathbf{y})$ am Rande des Integrationsgebietes verschwindet.

Da diese Gleichung nun für beliebige Funktionen $f(\mathbf{y})$ gelten muß, folgt mit $\mathbf{B}\mathbf{B}^T = \mathbf{D}$ die obige Aussage.

Anhang D

Semi-empirisches Modell für Hauptplasma-Parameter in TEXTOR

Wir gehen von der allgemeinen Form der Fluid-Gleichungen aus, wie sie sich aus der Integration der Gleichung (1.2) für jede Spezies im Plasma ergibt (siehe auch (1.16), der Index für die Spezies wird hier weggelassen).

$$\frac{\partial n}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (n V_i) \quad (\text{D.1})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (m n V_k) &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} (m n V_k V_i + n T \delta_{ki} + \Pi_{ki}) \\ &\quad + e n (\mathbf{E} + \mathbf{V} \times \mathbf{B})_k + R_k \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

$$\begin{aligned} n \frac{\partial T}{\partial t} &= - \sum_i \left(n V_i \frac{\partial T}{\partial x_i} + \frac{2}{3} n T \frac{\partial V_i}{\partial x_i} + \frac{2}{3} \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \right. \\ &\quad \left. + \sum_k \Pi_{ki} \frac{\partial V_k}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} Q \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Zu den Standard-Definitionen der einzelnen Größen siehe Balescu und Baelmans (Balescu 1988, Baelmans 1994). Statt (D.3) wird üblicherweise eine Gleichung in konservativer Form für die Energie verwendet.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n T + \frac{1}{2} m n \sum_i V_i^2 \right) &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{5}{2} n T V_i + q_i \right. \\
&\quad \left. + \sum_k \Pi_{ik} V_k + \sum_k \frac{1}{2} m n V_i^2 V_k \right) \quad (D.4) \\
&\quad + \sum_i e n V_i E_i + \sum_i V_i R_i + Q \quad .
\end{aligned}$$

Die Gleichungen (D.1), (D.2) und (D.4) werden nun für die Richtungen entlang (l) und senkrecht (x) zum Magnetfeld geschrieben. Näherungsweise werden dabei die Krümmung der Magnetfeldlinien und der Viskositätstensor Π_{ik} vernachlässigt und für die kinetische Energie $\approx \frac{1}{2} m n V_{\parallel}^2$ gesetzt.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n}{\partial t} &= - \frac{\partial}{\partial l} (n V_{\parallel}) - \frac{\partial \Gamma_{\perp}}{\partial x} \\
\frac{\partial}{\partial t} (m n V_{\parallel}) &= - \frac{\partial}{\partial l} (m n V_{\parallel}^2 + n T) - \frac{\partial}{\partial x} (m \Gamma_{\perp} V_{\parallel}) \\
&\quad + e n E_{\parallel} + R_{\parallel} \\
\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{3}{2} n T + \frac{1}{2} m n V_{\parallel}^2 \right) &= - \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{5}{2} n T V_{\parallel} + q_{\parallel} + \frac{1}{2} m n V_{\parallel}^2 V_{\parallel} \right) \quad (D.5) \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{5}{2} \Gamma_{\perp} T + q_{\perp} + \frac{1}{2} m V_{\parallel}^2 \Gamma_{\perp} \right) \\
&\quad + e n V_{\parallel} E_{\parallel} + e \Gamma_{\perp} E_{\perp} + V_{\parallel} R_{\parallel} + V_{\perp} R_{\perp} \\
&\quad + Q \quad .
\end{aligned}$$

Für den stationären Fall und unter Einbeziehung zusätzlicher Quellterme lauten die Gleichungen (D.5):

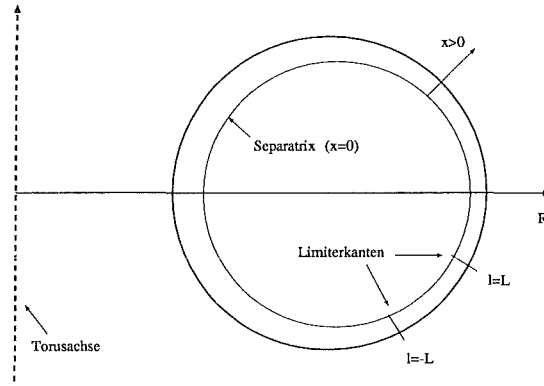


Abbildung D.1: Geometrie des Modellplasmas (Poloidschnitt im TEXTOR-Plasma). Die Struktur an der Separatrix nähert den ALT-Limiter.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial l} (n V_{\parallel}) + \frac{\partial \Gamma_{\perp}}{\partial x} &= S_0 \\
\frac{\partial}{\partial l} (m n V_{\parallel}^2 + n T) + \frac{\partial}{\partial x} (m \Gamma_{\perp} V_{\parallel}) &= e n E_{\parallel} + R_{\parallel} + R_0 \\
\frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{5}{2} n T V_{\parallel} + \frac{1}{2} m n V_{\parallel}^2 V_{\parallel} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{5}{2} \Gamma_{\perp} T + \frac{1}{2} m V_{\parallel}^2 \Gamma_{\perp} \right) & \\
+ \frac{\partial q_{\parallel}}{\partial l} + \frac{\partial q_{\perp}}{\partial x} &= e n V_{\parallel} E_{\parallel} + e \Gamma_{\perp} E_{\perp} + V_{\parallel} R_{\parallel} + V_{\perp} R_{\perp} \\
+ Q + Q_0 &.
\end{aligned} \tag{D.6}$$

Für die Modellierung der Plasma-Parameter n , T_i und $V_{\parallel}$ (Dichte, Temperatur und Strömungsgeschwindigkeit der Hintergrundionen) wird der folgende vereinfachte Satz von Gleichungen betrachtet (T_e ist die Elektronentemperatur, die entlang der Magnetfeldlinien als konstant angenommen wird)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial l} (n V_{\parallel}) &= S_0 \\
\frac{\partial}{\partial l} (m n V_{\parallel}^2 + n T_i) &= e n E_{\parallel} \\
\frac{\partial}{\partial l} (n T_e) &= -e n E_{\parallel} \\
\frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{5}{2} n V_{\parallel} T_i - \kappa_{\parallel} \frac{\partial T_i}{\partial l} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{5}{2} \Gamma_{\perp} T_i + q_{\perp} \right) &= 0 \quad .
\end{aligned} \tag{D.7}$$

Da der Gesamtfluß senkrecht zur Flußfläche für $x \rightarrow \infty$ verschwindet, kann man den Fluß an der Separatrix mit Hilfe der letzten Gleichung aus (D.7) folgendermaßen ausdrücken

$$\left(\frac{5}{2} \Gamma_{\perp} T_i + q_{\perp} \right) \Big|_{x=0} = - \int_0^{\infty} \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{5}{2} n V_{\parallel} T_i - \kappa_{\parallel} \frac{\partial T_i}{\partial l} \right) dx \quad . \quad (\text{D.8})$$

Unter der Annahme, daß dieser Fluß entlang der Separatrix näherungsweise konstant ist, besteht die Integration der linken Seite über l nur aus einer Multiplikation mit l . Zur Integration der rechten Seite verwenden wir für $x > 0$ die Ansätze

$$\kappa_{\parallel} = A T_i^{5/2} \quad ; \quad T_i = T_i^S(l) e^{-x/\delta_T} \quad ; \quad \Gamma_{\parallel} = \Gamma_{\parallel}^S \frac{l}{L} e^{-x/\delta_{\Gamma}} \quad . \quad (\text{D.9})$$

$\Gamma_{\parallel}^S$ ist dabei eine Konstante, die durch das Bohm-Kriterium (Chen 1974) festgelegt ist (Strömungsgeschwindigkeit am Limiter ist gleich Schallgeschwindigkeit c_s)

$$\Gamma_{\parallel}^S = n^S(L) c_s \quad ; \quad c_s = \sqrt{\frac{T_e + T_i}{m}} \quad . \quad (\text{D.10})$$

Die Ionenwärmeleitfähigkeit $\kappa_{\parallel}$ entnehmen wir der fluidtheoretischen Theorie, wie sie in den Abschnitten 1.2 und 1.3 angesprochen wurde (Balescu 1988)

$$A = \frac{15}{8 \sqrt{\pi}} \frac{16 \pi^2 \varepsilon_0^2}{e^4 \lambda} \frac{\tilde{\kappa}_{\parallel}}{\sqrt{m}} \quad , \quad (\text{D.11})$$

mit $\tilde{\kappa}_{\parallel} = 1.0/0.5657$.

Man erhält

$$\left(\frac{5}{2} \Gamma_{\perp} T_i + q_{\perp} \right) \Big|_{x=0} l = - \frac{5}{2} \Gamma_{\parallel}^S T_i^S \frac{l}{L} \frac{\delta_{\Gamma} \delta_T}{\delta_{\Gamma} + \delta_T} + A (T_i^S)^{5/2} \frac{\partial T_i^S}{\partial l} \frac{2 \delta_T}{7} \quad . \quad (\text{D.12})$$

Eine weitere Gleichung für den unbekannten Fluß an der Separatrix ergibt sich durch die Randbedingung am Limiter, d. h. bei $l = \pm L$ (Igitkhanov 1985)

$$\begin{aligned} \left(\frac{5}{2} \Gamma_{\perp} T_i + q_{\perp} \right) \Big|_{x=0} L &= - \int_0^{\infty} \gamma \Gamma_{\parallel}^S T_i^S dx \\ &= - \gamma \Gamma_{\parallel}^S T_i^S(L) \frac{\delta_{\Gamma} \delta_T}{\delta_{\Gamma} + \delta_T} \quad . \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Die dimensionslose Größe γ ist dabei eine Funktion der Temperaturen an der Separatrix bei $l = L$

$$\gamma = \frac{(2 + M^2) e^{-M^2} + \sqrt{\pi} M (M^2 + 2.5) (1 + \Phi(M))}{e^{-M^2} + \sqrt{\pi} M (1 + \Phi(M))} \quad (\text{D.14})$$

mit

$$M = \sqrt{\frac{2 T_i^S(L)}{T_e^S(L) + T_i^S(L)}} \quad (\text{D.15})$$

Es ergibt sich eine einfache Differentialgleichung für die Temperatur $T_i^S(l)$ entlang der Separatrix

$$\frac{2A}{7} (T_i^S)^{5/2} \frac{\partial T_i^S}{\partial l} = \Gamma_{\parallel}^S \frac{l}{L} \frac{\delta_{\Gamma}}{\delta_{\Gamma} + \delta_T} \left(\frac{5}{2} T_i^S - \gamma T_i^S(L) \right) \quad , \quad (\text{D.16})$$

die problemlos numerisch gelöst werden kann.

Addiert man nun die zweite und dritte Gleichung aus (D.7) und berücksichtigt die Randbedingung $V_{\parallel} = c_s$ am Limiter, so folgt

$$m n V_{\parallel}^2 + n T_i + n T_e = 2 m n(L) c_s^2 \quad . \quad (\text{D.17})$$

Schließlich folgt noch aus der ersten Gleichung von (D.7)

$$n V_{\parallel} = S_0 l = \Gamma_{\parallel}^S \frac{l}{L} e^{-x/\delta_{\Gamma}} \quad . \quad (\text{D.18})$$

Dabei wurde vorausgesetzt, daß $S_0 = \Gamma_{\parallel}^S e^{-x/\delta_{\Gamma}}/L = \text{const.}$ ist.

Die drei Gleichungen (D.16), (D.17) und (D.18) lassen die Berechnung der Größen n , T_i und $V_{\parallel}$ (und ihrer Ableitungen) entlang der Separatrix zu. Die Extrapolation für $x > 0$ wird durch Vorgabe der Abfallängen δ_{Γ} , δ_T (sowie einer Abfallänge für die Elektronentemperatur) vorgenommen. Für die Parameter innerhalb der Separatrix ($x < 0$) wird gesetzt

$$n = n^C \left(1 - \frac{(x + x_S)^2}{a_n} \right) \quad ; \quad T = T^C \left(1 - \frac{(x + x_S)^2}{a_T} \right)^2 \quad , \quad (\text{D.19})$$

worin die Parameter a_n und a_T so gewählt sind, daß die Profile der Plasmagrößen einen stetigen Übergang bei $x = x_S$ und $l = 0$ besitzen. Der Index C steht für das Plasmazentrum.

Letztlich benötigt unser Modellplasma nur die Vorgabe der Parameter $n^S(L)$, n^C , $T_i^S(L)$, T_i^C , T_e^S , T_e^C , also einiger Eckwerte für die Ionen- und Elektronentemperatur, sowie der Abfallängen δ_{Γ} und δ_T (δ_T für Ionen und Elektronen unterschiedlich).

Anhang E

Statistische Auswertung des Monte-Carlo-Algorithmus

Die praktischen Rechnungen der Abschnitte 2.3.1 bis 2.3.3 und des Kapitels 3 basieren alle auf dem gleichen Grundmuster, das in Abbildung E.1 schematisch dargestellt ist.

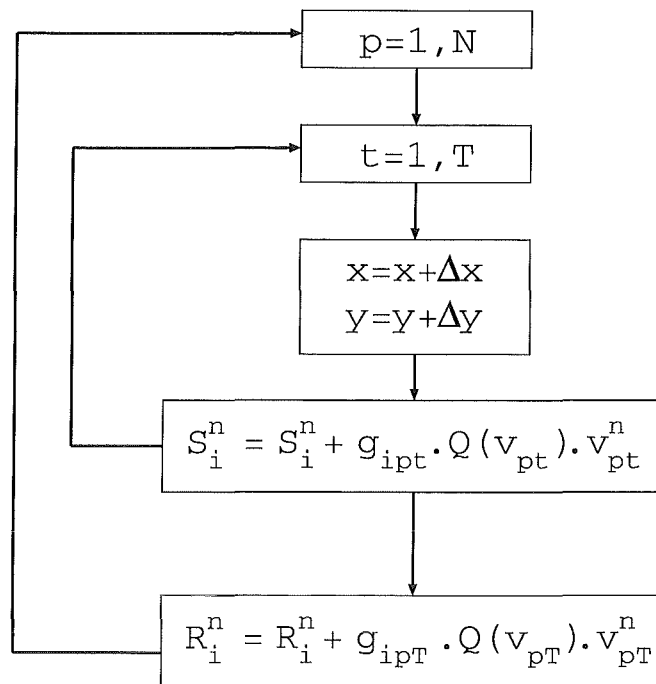


Abbildung E.1: Schematische Darstellung der Teilchen- und Zeitschleife im Monte-Carlo-Algorithmus.

Die Rechnung verläuft so, daß die Trajektorien im Phasenraum für N Teilchen über T Zeitschritte verfolgt werden, wobei die diskreten Schritte Δx im Orts- und

Δv im Geschwindigkeitsraum pro Zeitschritt durch das jeweilige Problem festgelegt sind. Das Rechengebiet im Ortsraum wird in Zellen mit Index i aufgeteilt und über jedes Teilchen p und jeden Zeitschritt t wird die Summe

$$S_i^n = \sum_{p,t} g_{ipt} Q(v_{pt}) v_{pt}^n \quad (\text{E.1})$$

gebildet. Darin ist g_{ipt} ein Gewichtungsfaktor, $Q(v_{pt})$ eine beliebige Funktion von v_{pt} und n eine nicht-negative ganze Zahl.

Eine weitere für unsere Anwendungen wichtige Größe ist die Summe

$$R_i^n = \sum_p g_{ipT} Q(v_{pT}) v_{pT}^n, \quad (\text{E.2})$$

die nur für einen bestimmten Zeitpunkt $t = T$ gebildet wird. Die Bedeutung von R_i^n ist einfach einzusehen:

$$R_i^n \approx N \int_{\Delta V_i} \int Q(v) v^n f(x, v) dv dx. \quad (\text{E.3})$$

$f(x, v)$ bezeichnet die Verteilungsfunktion der Teilchen im Phasenraum. ΔV_i ist das Volumen der i -ten Zelle. Die Anzahl N_i der Teilchen in der i -ten Zelle zum Zeitpunkt T ist damit durch die Summe

$$N_i = \sum_p g_{pT} \approx N \int_{\Delta V_i} \int f(x, v) dv dx \quad (\text{E.4})$$

gegeben. Der Mittelwert $\langle Q(v) v^n \rangle$ für die Zelle i wird also mit folgender Formel berechnet

$$\langle Q(v) v^n \rangle = \frac{\int Q(v) v^n f(x, v) dv}{\int f(x, v) dv} \approx \frac{R_i^n}{N_i}. \quad (\text{E.5})$$

Diese Formel muß zum Beispiel zur Berechnung von Temperaturen und anderen Momenten der Geschwindigkeitsverteilung benutzt werden. Dabei ergeben sich aber oft numerische Probleme, da zum einen hierbei ein Quotient aus zwei voneinander abhängigen statistischen Größen gebildet wird, für den man nicht in allgemeiner Weise eine Abschätzung für Fehlergrenzen angeben kann, zum andern auch die Situation auftreten kann, daß die Teilchenzahl in einzelnen räumlichen Zellen des Rechengitters nur sehr klein ist oder gar verschwindet. Größen hingegen wie die Energiedichte u. ä. können problemlos berechnet werden und durch Fehlergrenzen (siehe Abschnitt 2.3.1) bewertet werden. Bei den Anwendungen der Abschnitte 2.3.1 bis 2.3.3 hingegen traten keine Schwierigkeiten mit der Berechnung von Temperaturen auf, da dort nur Probleme im Geschwindigkeitsraum betrachtet wurden, das räumliche Rechengebiet sich also auf eine einzige Zelle beschränkte. Dann gilt

$$\langle Q(v) v^n \rangle = \frac{R^n}{N} \quad , \quad (\text{E.6})$$

d. h. der Mittelwert $\langle Q(v) v^n \rangle$ ist direkt durch Division mit der Zahl N der Simulationsteilchen gegeben.

Die Summe S_i^n , die über alle Teilchen und alle Zeitpunkte gebildet wird, ist für die Anwendungen des Kapitels 3 von Bedeutung. Dort wurden konstante Teilchenquellen untersucht, die fortwährend Teilchen ins Rechengebiet einbrachten. Prinzipiell wäre es deshalb notwendig, um Auskunft über die stationäre Verteilung der Teilchen zu erhalten, während der Simulation ständig neue Ensembles von Simulationsteilchen zu starten und eine immer größere Zahl von Teilchen numerisch zu verfolgen. Um dieses rechnerische Problem zu umgehen, benutzten wir das in Abschnitt 2.5 erläuterte Konzept, indem wir nur ein Ensemble von N Teilchen zum Zeitpunkt $t = 1$ in das Rechengebiet einbrachten und deren Trajektorien verfolgten, jedoch annahmen, daß die Teilchen, die zu einem bestimmten Zeitpunkt t registriert werden, zu einem unabhängigen Ensemble gehören. Das soll heißen, daß ein Teilchen, das zu den Zeitpunkten $t = t'$ und $t = t' + 1$ registriert wird, jeweils einmal zu zwei verschiedenen Ensembles gerechnet wird, die um einen Zeitschritt verschoben in das Rechengebiet eingebracht wurden. Durch die Verfolgung eines Ensembles wird also die Verfolgung vieler gleichartiger Ensembles genähert. Dies setzt natürlich voraus, daß das Ensemble in der Simulation zu jedem Zeitpunkt statistisch repräsentativ ist. In der Gleichung für S_i^n drücken wir dies dadurch aus, daß wir die Indizes p und t zu einem neuen Teilchenindex p' zusammenfassen

$$S_i^n = \sum_{p,t} g_{ipt} Q(v_{pt}) v_{pt}^n = \sum_{p'} g_{ip'} Q(v_{p'}) v_{p'}^n \quad . \quad (\text{E.7})$$

Für die Berechnung von Momenten gilt dann wieder das oben für R_i^n gesagte.

Anhang F

Artifizielle Quellen und Senken bei der driftkinetischen Approximation

Der Koeffizient des Quellterms, der nach der driftkinetischen Approximation der linken Seite von Gleichung (1.14) nun in Gleichung (1.57) in Erscheinung tritt, lautet

$$\nabla (\dot{\mathbf{R}} - v_{\parallel} \mathbf{b}) = \nabla \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} + \frac{m v_{\perp}^2}{2 Z e} \frac{\mathbf{b} \times \nabla B}{B^2} - \frac{m v_{\parallel}^2}{Z e} \frac{\mathbf{b} \times (\mathbf{b} \times \text{rot} \mathbf{b})}{B} \right) . \quad (\text{F.1})$$

Unter Benutzung der Beziehungen

$$\text{rot} \mathbf{B} = B \cdot \text{rot} \mathbf{b} + \nabla B \times \mathbf{b} \quad (\text{F.2})$$

$$\mathbf{b} \times (\mathbf{b} \times \text{rot} \mathbf{b}) = (\mathbf{b} \cdot \text{rot} \mathbf{b}) \mathbf{b} - \text{rot} \mathbf{b}$$

läßt sich der Koeffizient umformen zu

$$\begin{aligned} \nabla (\dot{\mathbf{R}} - v_{\parallel} \mathbf{b}) = \nabla \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} + \frac{m v_{\perp}^2}{2 Z e} \frac{\mathbf{b} \times \nabla B}{B^2} - \frac{m v_{\parallel}^2}{Z e} \frac{(\mathbf{b} \cdot \text{rot} \mathbf{B}) \mathbf{b}}{B^2} \right. \\ \left. + \frac{m v_{\parallel}^2}{Z e} \frac{\text{rot} \mathbf{B}}{B^2} + \frac{m v_{\parallel}^2}{Z e} \frac{\mathbf{b} \times \nabla B}{B^2} \right) . \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

In unserem axialsymmetrischen Modellfeld für die TEXTOR-Magnetfeldkonfiguration (siehe Abschnitt 3.1.1) gilt $\text{rot} \mathbf{B} \cdot \nabla B = 0$, da wir für das Toroidalfeld das Vakuumfeld benutzten und die kleinen Poloidalströme vernachlässigten. Damit folgt

$$\begin{aligned}\nabla \left(\frac{\mathbf{b} \times \nabla B}{B^2} \right) &= \frac{\text{rot} \mathbf{B} \cdot \nabla B}{B^2} = 0 \\ \nabla \left(\frac{\text{rot} \mathbf{B}}{B^2} \right) &= -\frac{2}{B^3} \text{rot} \mathbf{B} \cdot \nabla B = 0 \quad ,\end{aligned}\tag{F.4}$$

und Gleichung (F.3) reduziert sich zu

$$\nabla (\dot{\mathbf{R}} - v_{\parallel} \mathbf{b}) = \nabla \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} - \frac{m v_{\parallel}^2}{Z e} \frac{(\mathbf{b} \cdot \text{rot} \mathbf{B}) \mathbf{b}}{B^2} \right) . \tag{F.5}$$

Betrachtet man nun ein Volumen V im Tokamak-Plasma, das von zwei Flußflächen eingeschlossen wird, so kann eine mittlere Quellstärke wie folgt berechnet werden

$$\begin{aligned}\frac{1}{V} \int_V \nabla \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} - \frac{m v_{\parallel}^2}{Z e} \frac{(\mathbf{b} \cdot \text{rot} \mathbf{B}) \mathbf{b}}{B^2} \right) dV = \\ \frac{1}{V} \int_{\partial V} \left(\frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} - \frac{m v_{\parallel}^2}{Z e} \frac{(\mathbf{b} \cdot \text{rot} \mathbf{B}) \mathbf{b}}{B^2} \right) d\mathbf{A} = 0 \quad .\end{aligned}\tag{F.6}$$

Hierbei wurde das Integral über das Volumen V mittels des gaußschen Satzes in ein Oberflächenintegral über die Berandung ∂V umgewandelt. Da die Oberflächennormale $d\mathbf{A}$ auf den Flußflächen immer senkrecht zu $\mathbf{B}$ steht, verschwindet die mittlere Quellstärke. Bei einer gleichmäßigen Verteilung der Verunreinigungen im Tokamak-Plasma würden die künstlichen Quellterme also im Mittel die Teilchenzahl unverändert lassen und in solchen Fällen wäre die Vernachlässigung dieser Quellen bzw. Senken völlig gerechtfertigt. Sind die Verunreinigungen aber nicht homogen im Plasma verteilt, was ein typisches Resultat unserer Rechnungen für die niedrigen Ladungsstufen der Verunreinigungen war, die zu kurzlebig sind, als daß sie sich im gesamten Plasmavolumen ausbreiten, so können die lokalen Quellen durchaus von Bedeutung sein. Um eine Vorstellung vom Verhältnis derartiger Quellen und Quelltermen wie sie aufgrund von Ionisation in unseren Anwendungen auftreten zu gewinnen, wollen wir folgende größenordnungsmäßige Abschätzung durchführen: den Anteil $\dot{\mathbf{R}} - v_{\parallel} \mathbf{b}$ der Guiding-Center-Geschwindigkeit schätzen wir ab durch $\varrho_L v_{th}/L_H$ mit der thermischen Geschwindigkeit $v_{th} = \sqrt{2T/m}$. Das Verhältnis ϱ_L/L_H aus Larmor-Radius ϱ_L und makroskopischer Gradientenlänge L_H repräsentiert dabei den kleinen Parameter δ aus den Gleichungen (1.54). Die Ableitung nach $\mathbf{R}$ wiederum schätzen wir durch Division mit der Gradientenlänge L_H ab, also

$$|\nabla (\dot{\mathbf{R}} - v_{\parallel} \mathbf{b})| \approx \left| \frac{\varrho_L v_{th}}{L_H^2} \right| \approx \left| \frac{v_{th}^2 m}{ZeBL_H^2} \right| = \left| \frac{2T}{ZeBL_H^2} \right| \approx 40 \text{ s}^{-1}$$

für $T = 100.0 \text{ eV}$, $Z = 1$, $B = 2.25 \text{ T}$, $L_H = B/|\nabla B| = 1.5 \text{ m}$.
(F.7)

Für Ionisationsraten von Kohlenstoff zum Beispiel (Abschnitt 3.1.2) ergeben sich für typische Elektronendichten von $n_e \approx 1 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$ und $T = 100 \text{ eV}$ Quellstärken in der Größenordnung von 10^5 s^{-1} , d. h. um den Faktor $2.5 \cdot 10^4$ größer als die von uns vernachlässigten Quellterme, die infolge der driftkinetischen Mittelungsprozedur auftraten.

Anhang G

Übersicht über die Größenordnung der Transportterme und Abschätzung des Monte-Carlo-Zeitschritts

In diesem Abschnitt werden typische Werte für die Transportterme der Gleichungen (1.61) in TEXTOR-Plasmen angegeben, indem wir die zeitlichen Änderungen Δx_i und Δv_i im Real- und Geschwindigkeitsraum abschätzen, die den stochastischen Prozeß in der Monte-Carlo-Simulation definieren (siehe Gleichung (2.21) und die Beispiele in den Abschnitten 2.3.1 bis 2.3.3). Die diskreten Änderungen Δx_i und Δv_i in den Trajektorien der Simulationsteilchen pro Monte-Carlo-Zeitschritt Δt sind gegeben durch die Größen $\dot{\mathbf{R}}$, $\dot{v}_{\parallel}$, $\dot{v}_{\perp}$ (Gleichung (1.54)) und $K_{\parallel}$, $K_{\perp}$, $D_{\parallel\parallel}$, $\dots$, $D_{\perp\perp}$ (Gleichung (1.52)) sowie dem anomalen Diffusionskoeffizienten $D_{\perp}$. Neben einem quantitativen Überblick über die Größenordnungen der einzelnen Effekte, dient die Analyse der Bewertung des von uns verwendeten Zeitschritts in der Simulation. Ein für eine zuverlässige Simulation geeigneter Zeitschritt sollte die Bedingungen erfüllen, daß zum einen die Realraumschritte Δx_i klein sind im Verhältnis zur Auflösung unseres räumlichen Rechengitters (das wiederum derartig in Zellen aufgeteilt sein sollte, daß die relative Änderung der Hintergrundparameter von Zelle zu Zelle nur klein ist), und zum anderen die relativen Änderungen $\Delta v_i/v_i$ viel kleiner als 1 sind. Ein allgemeines Rezept zur Wahl des Zeitschritts Δt existiert nicht und man muß diesen jeweils den Parametern des interessierenden Problems anpassen. Zur Verringerung des Rechenaufwands ist dann der größtmögliche Zeitschritt zu wählen, der die genannten Forderungen erfüllt. Die Parameter entnehmen wir dem Modell-Plasma des Abschnitts 3.2.2 und dem entsprechenden Magnetfeldfeld des Abschnitts 3.1.1. Zur Abschätzung

der Terme (1.54) betrachten wir den Bereich

$$v_{\parallel}, v_{\perp} \leq 2 \cdot 10^5 \text{ m/s} \quad , \quad (\text{G.1})$$

was thermischen Geschwindigkeiten $v_{th} = \sqrt{2T/m}$ von Kohlenstoff ($m = 12 m_p$) für $T \leq 1000 \text{ eV}$ entspricht. Die einzelnen Summanden der Drift- und Diffusionskoeffizienten $K_{\parallel}$, $K_{\perp}$, $D_{\parallel\parallel}$, $\dots$, $D_{\perp\perp}$ schätzen wir ab mit Hilfe der Werte von C_1 und C_2 , die sich in Abschnitt 1.5.2 als die in unserem Modell maximal möglichen ergaben, d. h.

$$|C_1| \leq 1 \quad ; \quad |C_2| \leq 0.8 \quad . \quad (\text{G.2})$$

Eine numerische Auswertung der Ausdrücke (1.52) (siehe auch Anhang B) zeigt, daß die Koeffizienten $K_{\parallel}$ und $K_{\perp}$ und die Eigenwerte λ_1 und λ_2 der zweidimensionalen Diffusionsmatrix mit den Komponenten $D_{\parallel\parallel}$, $D_{\parallel\perp}$, $D_{\perp\parallel}$ und $D_{\perp\perp}$ folgender Beschränkung¹ unterworfen sind

$$\begin{aligned} |K_{\parallel}| &< (3 + 10 C_1 + 3 C_2) \alpha^2 \Lambda \\ |K_{\perp}| &< (10 + 10 C_1 + 10 C_2) \alpha^2 \Lambda \\ |\lambda_1|, |\lambda_2| &< (1 + C_1 + 3 C_2) \alpha \Lambda \end{aligned} \quad (\text{G.3})$$

(Das Massenverhältnis, das in die Ausdrücke von $K_{\parallel}$ und $K_{\perp}$ eingeht, wurde als ungefähr 1/10 angenommen).

Für unser betrachtetes TEXTOR-Plasma und Kohlenstoffverunreinigungen ergeben sich folgende Werte für Λ und α

$$\begin{aligned} |\Lambda| &\leq Z^2 \cdot 5 \cdot 10^{17} \text{ m}^3/\text{s}^4 \quad ; \quad |\alpha| \leq 1.5 \cdot 10^{-5} \text{ s/m} \\ |\alpha \Lambda| &\leq Z^2 \cdot 3 \cdot 10^{12} \text{ m}^2/\text{s}^3 \quad ; \quad |\alpha^2 \Lambda| \leq Z^2 \cdot 1.8 \cdot 10^7 \text{ m/s}^2 \quad . \end{aligned} \quad (\text{G.4})$$

Des weiteren gilt für dieses Szenario

¹Hierbei ist anzumerken, daß $K_{\perp}$ für $v_{\perp} \rightarrow 0$ natürlich gegen Unendlich geht und damit im Prinzip unbeschränkt wäre. Doch widerspräche der Wert $v_{\perp} = 0$ unseren Modellvoraussetzungen (schnelle Gyration der Teilchen um die Magnetfeldlinie) weshalb wir für die normierte Geschwindigkeit $\chi_{\perp}$ eine untere Grenze von $\chi_{\perp} = 0.05$ ansetzten. Die für $v_{\perp} \rightarrow 0$ stark anwachsende Funktion $K_{\perp}$ verhindert im Modell, daß $v_{\perp}$ beliebig klein werden kann.

$$\begin{aligned}
\left| \frac{1}{2} \nabla \mathbf{b} \right| &\leq 3 \cdot 10^{-2} \text{ m}^{-1} \\
\left| \frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} \right| &\leq Z \cdot 1 \cdot 10^9 \text{ m/s}^2 \\
\left| \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \right| &\leq 2 \cdot 10^4 \text{ m/s} \\
\left| \frac{1}{2} \frac{\mathbf{b} \times \nabla B}{\Omega B} \right| &\leq \frac{1}{Z} \cdot 2 \cdot 10^{-8} \text{ s/m} \\
\left| \frac{\mathbf{b} \times (\mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{b}))}{\Omega} \right| &\leq \frac{1}{Z} \cdot 3 \cdot 10^{-8} \text{ s/m}
\end{aligned} \tag{G.5}$$

Unter Verwendung dieser Plasma-Parameter schätzen wir die in der Simulation möglichen Schrittgrößen Δx und Δv ab, wobei wir einen Zeitschritt von $\Delta t = 1 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ (wie er von uns in den praktischen Rechnungen benutzt wurde) annehmen. Für den anomalen Diffusionskoeffizienten $D_{\perp}$ setzen wir $D_{\perp} = 1 \text{ m}^2/\text{s}$. In den Tabellen G.1 und G.2 sind die maximalen Schrittgrößen, die durch die einzelnen Effekte verursacht werden, aufgeführt. Man erkennt, daß in allen Fällen die Geschwindigkeitsänderungen klein sind gegen typische thermische Geschwindigkeiten im eV-Bereich. Auch entsprechen die maximalen Schritte im Realraum der Forderung klein zu sein im Vergleich mit den Abmessungen unserer Zellen (sie umfassen Bereiche von einigen Zentimetern in Magnetfeldrichtung und einigen Millimetern in radialer Richtung). Die Wahl unseres Zeitschrittes ist damit für unsere Rechnungen angemessen. Es ist noch anzumerken, daß die Wahl des Zeitschrittes Δt sich außerdem an den in unserem Modell einbezogenen Ionisations- und Rekombinationsprozessen orientieren muß. Und zwar nahmen wir in den Ausführungen des Abschnitts 2.4 zum Monte-Carlo-Algorithmus an, daß pro Zeitschritt nur eine Änderung der Ladungszahl Z um ± 1 stattfinden kann. Dies ist natürlich nicht mehr sinnvoll, wenn der Zeitschritt so groß gewählt wird, daß viele Übergänge stattfinden können. Um den Algorithmus konsistent zu halten, ist es deshalb notwendig, den Zeitschritt so klein zu wählen, daß bereits die Änderung $Z \rightarrow Z \pm 1$ eine nur kleine Wahrscheinlichkeit besitzt. Betrachtet man die maximalen Ionisationsraten des Abschnitts 3.1.2 für Kohlenstoff ($S_I = 1 \cdot 10^5 \text{ s}^{-1}$ für Elektronendichten $n_e \sim 1 \cdot 10^{18} \text{ m}^{-3}$), so zeigt sich, daß eine Ladungszahländerung in der Zeit $\Delta t = 1 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ eine Wahrscheinlichkeit $p \sim 1 \cdot 10^{-2}$ besitzt. Eine Änderung $Z \rightarrow Z \pm 2$ besäße demgemäß nur noch eine Wahrscheinlichkeit $p \sim 1 \cdot 10^{-4}$ und kann als vernachlässigbar angesehen werden.

Parallel-Drift:

$$\Delta x = v_{\parallel} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta x| \leq 1 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

 $E \times B$ -Drift:

$$\Delta x = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta x| \leq 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}$$

 ∇B -Drift:

$$\Delta x = \frac{v_{\perp}^2}{2\Omega} \frac{\mathbf{b} \times \nabla B}{B} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta x| \leq \frac{1}{Z} 8 \cdot 10^{-5} \text{ m}$$

Krümmungsdrift:

$$\Delta x = \frac{v_{\parallel}^2}{\Omega} \mathbf{b} \times (\mathbf{b} \times (\nabla \times \mathbf{b})) \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta x| \leq \frac{1}{Z} 1 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

Anomaler Transport:

$$\Delta x = \pm \sqrt{D_{\perp}} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta x| \leq 3 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

Tabelle G.1: Obergrenzen für die diskreten Monte-Carlo-Schritte im Realraum für einen Zeitschritt von $\Delta t = 1 \cdot 10^{-7} \text{ s}$. Zugrundegelegt wurden die Plasma-Parameter des Modell-Plasmas aus Abschnitt 3.2.2

Paralleles elektrisches Feld:

$$\Delta v = \frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta v| \leq Z \cdot 1 \cdot 10^2 \text{ m/s}$$

Spiegel-Effekt:

$$\Delta v = \frac{1}{2} v_{\perp}^2 \nabla \mathbf{b} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta v| \leq 1 \cdot 10^2 \text{ m/s}$$

$$\Delta v = -\frac{1}{2} v_{\parallel} v_{\perp} \nabla \mathbf{b} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta v| \leq 1 \cdot 10^2 \text{ m/s}$$

Coulomb-Streuung:

$$\Delta v = K_{\parallel} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta v| \leq Z^2 \cdot 2 \cdot (0.3 + C_1 + 0.3 C_2) \cdot 10^2 \text{ m/s}$$

$$\Delta v = K_{\perp} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta v| \leq Z^2 \cdot 2 \cdot (1 + C_1 + C_2) \cdot 10^2 \text{ m/s}$$

$$\Delta v = \pm \sqrt{\lambda_{1,2}} \Delta t \quad \longrightarrow \quad |\Delta v| \leq Z \cdot 6 \cdot \sqrt{1 + C_1 + 3 C_2} \cdot 10^2 \text{ m/s}$$

Tabelle G.2: Obergrenzen für die diskreten Monte-Carlo-Schritte im Geschwindigkeitsraum für einen Zeitschritt von $\Delta t = 1 \cdot 10^{-7} \text{ s}$. Zugrundegelegt wurden die Plasma-Parameter des Modell-Plasmas aus Abschnitt 3.2.2

Anhang H

Vergleich des Codes DORIS mit anderen Monte-Carlo-Transport-Codes

Der Umfang des von uns entwickelten Transport-Modells und des darauf basierenden Monte-Carlo-Codes wird an dieser Stelle durch Vergleich mit zwei bekannten, in der Literatur ausführlich dokumentierten Monte-Carlo-Codes zum Verunreinigungstransport zusammenfassend dargestellt. Wir beziehen uns hierbei auf die Codes DIVIMP (Stangeby 1992) und IMPMC (Takizuka und Shimizu 1994). Wir vergleichen die unterschiedlichen Arten der Simulation des Transports der geladenen Verunreinigungen, da unsere Weiterentwicklungen im wesentlichen diesen Punkt betreffen. Die Simulation von Ionisations-, Rekombinations- und Zerstäubungsprozessen unterscheidet sich in den Codes nur unwesentlich oder garnicht, weshalb sie – genauso wie Unterschiede in Optionen für die Rechengeometrie – hier nicht angesprochen werden.

Die Transport-Algorithmen in den Codes DIVIMP und IMPMC lauten:

$$\begin{aligned} \text{DIVIMP: } \Delta x_{\parallel} &= v_{\parallel} \Delta t \\ \Delta x_r &= \sqrt{2 D_{\perp} \Delta t} \gamma_1 \\ \Delta v_{\parallel} &= \langle \Delta w_{\parallel} \rangle \Delta t + \sqrt{\langle (\Delta w_{\parallel})^2 \rangle \Delta t} \gamma_2 \\ &\quad + \frac{Ze}{m} E_{\parallel} \Delta t + \frac{\alpha_e}{m} \nabla_{\parallel} T_e \Delta t + \frac{\beta_Z}{m} \nabla_{\parallel} T_b \Delta t \end{aligned} \tag{H.1}$$

$$\begin{aligned}
\text{IMPMC: } \Delta x_{\parallel} &= v_{\parallel} \Delta t \\
\Delta x_r &= \sqrt{2 D_{\perp} \Delta t} \gamma_1 \\
\Delta v_{\parallel} &= \langle \Delta w_{\parallel} \rangle \Delta t + \sqrt{\langle (\Delta w_{\parallel})^2 \rangle \Delta t} \gamma_2 \\
&\quad + \frac{Ze}{m} E_{\parallel} \Delta t + \frac{\alpha_e}{m} \nabla_{\parallel} T_e \Delta t + \frac{\beta_Z}{m} \nabla_{\parallel} T_b \Delta t \\
\Delta v_{\perp} &= \sqrt{\langle (\Delta w_{\perp})^2 \rangle \Delta t} \gamma_3
\end{aligned} \tag{H.2}$$

Die Indizes $\parallel$, $\perp$ und r bezeichnen dabei die Richtungen parallel und senkrecht zum Magnetfeld bzw. in radialer Richtung. T_b ist die Temperatur der Hintergrundionen, T_e die Temperatur der Elektronen. Die Größen γ_1 , γ_2 und γ_3 sind gaußverteilte Zufallszahlen mit Mittelwert 0 und Varianz 1. $D_{\perp}$ ist auch hier wieder der Koeffizient der anomalen Diffusion. β_Z ist der Koeffizient der Thermokraft, die von den Hintergrundionen ausgeübt wird. Er wurde im Abschnitt 1.5.1 ausführlich besprochen. α_e ist der Koeffizient einer Thermokraft, die von den Elektronen auf die Verunreinigungen ausgeübt wird ($\alpha_e = 0.71 \cdot Z^2$, Neuhauser et al. 1984). Die Koeffizienten $\langle \Delta w_{\parallel} \rangle$, $\langle (\Delta w_{\parallel})^2 \rangle$ und $\langle (\Delta w_{\perp})^2 \rangle$ beschreiben die Coulomb-Streuung an Hintergrundionen, die einer ungestörten Maxwell-Verteilung gehorchen. Sie stellen Näherungsausdrücke für die in Abschnitt 2.3.3 angegebenen Koeffizienten $\langle \Delta v_{\parallel} \rangle$, $\langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle$ und $\langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle$ für den Grenzfall $\chi \ll 1$ dar, also für kleine Relativgeschwindigkeiten zwischen den Verunreinigungen und den Hintergrundionen (im Verhältnis zur thermischen Geschwindigkeit der Hintergrundionen).

$$\langle \Delta v_{\parallel} \rangle, \langle (\Delta v_{\parallel})^2 \rangle, \langle (\Delta v_{\perp})^2 \rangle \xrightarrow{\chi \ll 1} \langle \Delta w_{\parallel} \rangle, \langle (\Delta w_{\parallel})^2 \rangle, 2 \langle (\Delta w_{\perp})^2 \rangle . \tag{H.3}$$

Die diesen Simulationsgleichungen entsprechenden Fokker-Planck-Gleichungen lauten (statt den Variablen $x_{\parallel}$ und x_r führen wir nun wieder die Guiding-Center-Koordinaten $\mathbf{R}$ ein, um den Vergleich mit unseren Modellgleichungen (1.61) übersichtlicher zu gestalten):

DIVIMP:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}^Z}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(v_{\parallel} \mathbf{b} \bar{f}^Z \right) - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} \bar{f}^Z \right) \\
& -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\langle \Delta w_{\parallel} \rangle \bar{f}^Z \right) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} \left(\langle (\Delta w_{\parallel})^2 \rangle \bar{f}^Z \right) \\
& + \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_k} (\hat{r}_i \hat{r}_k D_{\perp} \bar{f}^Z) \\
& - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\frac{\alpha_e}{m} \nabla_{\parallel} T_e \bar{f}^Z \right) - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\frac{\beta_Z}{m} \nabla_{\parallel} T_b \bar{f}^Z \right)
\end{aligned} \tag{H.4}$$

IMPMC:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}^Z}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(v_{\parallel} \mathbf{b} \bar{f}^Z \right) - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\frac{Ze}{m} \mathbf{E} \mathbf{b} \bar{f}^Z \right) \\
& -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\langle \Delta w_{\parallel} \rangle \bar{f}^Z \right) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} \left(\langle (\Delta w_{\parallel})^2 \rangle \bar{f}^Z \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} \left(\langle (\Delta w_{\perp})^2 \rangle \bar{f}^Z \right) \\
& + \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_k} (\hat{r}_i \hat{r}_k D_{\perp} \bar{f}^Z) \\
& - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\frac{\alpha_e}{m} \nabla_{\parallel} T_e \bar{f}^Z \right) - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left(\frac{\beta_Z}{m} \nabla_{\parallel} T_b \bar{f}^Z \right)
\end{aligned} \tag{H.5}$$

Zum Zwecke der Übersichtlichkeit seien hier auch unsere Modellgleichungen für den Verunreinigungstransport nochmals aufgeführt (siehe Gleichung (1.61); zu den Definitionen der einzelnen Koeffizienten siehe (1.52) und (1.54)).

DORIS:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{f}^Z}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\dot{\mathbf{R}} \bar{f}^Z) - \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (\dot{v}_{\parallel} \bar{f}^Z) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (\dot{v}_{\perp} \bar{f}^Z) \\
& -\frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} (K_{\parallel} \bar{f}^Z) - \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} (K_{\perp} \bar{f}^Z) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel}^2} (D_{\parallel\parallel} \bar{f}^Z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\parallel} \partial v_{\perp}} (D_{\parallel\perp} \bar{f}^Z) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp} \partial v_{\parallel}} (D_{\perp\parallel} \bar{f}^Z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_{\perp}^2} (D_{\perp\perp} \bar{f}^Z) \\
& + \sum_{i,k} \frac{\partial^2}{\partial R_i \partial R_k} (\hat{r}_i \hat{r}_k D_{\perp} \bar{f}^Z)
\end{aligned} \tag{H.6}$$

Folgende Unterschiede zwischen den Modellen der drei Code-Systeme werden erkennbar:

- In den Codes DIVIMP und IMPMC wird von der Guiding-Center-Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{R}}$ nur die parallele Driftbewegung $v_{\parallel} \mathbf{b}$ berücksichtigt. Die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift, die ∇B -Drift und die Krümmungsdrift werden bei dieser Transportsimulation vernachlässigt. In den Code DORIS sind diese Effekte implementiert. Die Abschätzungen des letzten Abschnitt haben gezeigt, daß für unsere Anwendungen auf TEXTOR-Plasmen gerade die $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift zu einer nicht zu vernachlässigenden Bewegung senkrecht zu den magnetischen Flußflächen führen kann.
- Von den Ausdrücken für die Geschwindigkeitsänderungen $\dot{v}_{\parallel}$ und $\dot{v}_{\perp}$ wird in den Codes DIVIMP und IMPMC nur das parallele elektrische Feld berücksichtigt. Die Terme $\sim \nabla \mathbf{b}$, die den Spiegeleffekt wiedergeben, fehlen dort, wurden jedoch in den Code DORIS implementiert. Diese Terme sind unabdingbar in der korrekten Einbeziehung der toroidalen Magnetfeldkonfiguration. Das Fehlen dieser Terme in DIVIMP und IMPMC bedeutet, daß in diesen Codes nur eine zylindrische Geometrie erfaßt wird, ein Mangel, der sich bei unkorrekter Normierung auf Torusvolumina in einer künstlichen Dichteerhöhung auf der Hochfeldseite des Tokamaks bemerkbar macht.
- Die Coulomb-Stoßterme in den Modellen von DIVIMP und IMPMC (die durch die Koeffizienten $\langle \Delta w_{\parallel} \rangle$, $\langle (\Delta w_{\parallel})^2 \rangle$ und $\langle (\Delta w_{\perp})^2 \rangle$ beschrieben werden) modellieren genauso wie im Code DORIS eine Coulomb-Streuung an den Ionen des Hintergrundplasmas. Jedoch wird in DIVIMP

und IMPMC nur eine Coulomb-Streuung an maxwell-verteilten Hintergrundionen betrachtet, wohingegen in DORIS die Streuung an Hintergrundionen, die einer gestörten Maxwell-Verteilung gehorchen, modelliert wird. Überdies werden nur einzelne Teile des Coulomb-Stoßterms in DIVIMP und auch IMPMC berücksichtigt (IMPMC erfaßt im Gegensatz zum Code DIVIMP zumindest noch eine diffusive Bewegung im Geschwindigkeitsraum in $v_{\perp}$ -Richtung). Diese rudimentären Coulomb-Stoßterme erlauben nicht die korrekte Berechnung der Temperaturen der Verunreinigungen und führen nicht auf eine Thermalisierung der Teilchen, was eine Minimalforderung an den Modell-Coulomb-Term wäre. Solche Mängel werden im Code DORIS vermieden, da wir den kompletten driftkinetischen Coulomb-Term verwenden.

- Die Coulomb-Streuung der Verunreinigungen an der Störung der Verteilungsfunktion führt – wie im Abschnitt 1.5.1 ausführlich diskutiert – zu einer konsistenten kinetischen Beschreibung der Kräfte, die infolge von Inhomogenitäten im Hintergrundplasma auf die Verunreinigungen wirken. In den Codes DIVIMP und IMPMC werden Effekte, die durch einen Temperaturgradienten in der Hintergrundionentemperatur verursacht werden, durch eine gemittelte Kraft genähert. Die Ausdrücke für diese Kräfte sind dabei der Fluid-Theorie entliehen, was zu einer Inkonsistenz im Modell führt, wie oben bereits angesprochen. Die Verwendung dieser fluidtheoretischen Ausdrücke für die Thermo-Kräfte liefert große Fehler in den Dichteprofilen, wenn die Verunreinigungen sich weit von einer Maxwell-Verteilung entfernt befinden, was insbesondere für die niedrig geladenen, kurzlebigen Verunreinigungen zutrifft, die niederenergetisch in das Plasma eintreten (zerstäubte Wandmaterialien etc.). Gerade diese Ladungsstufen sind aber bei der Linienstrahlung der Verunreinigungen dominant und deshalb von großem Interesse für die Tokamak-Physik. Auch eine durch Inhomogenitäten in der Elektronentemperatur hervorgerufene Thermo-Kraft wird in den Codes DIVIMP und IMPMC berücksichtigt. Wir vernachlässigten im Code DORIS die Coulomb-Streuung an den Elektronen (siehe auch die Fußnote in Abschnitt 3.2.1). Da in DIVIMP und IMPMC aber auch dabei wieder eine fluidtheoretische Näherung für diesen Effekt verwendet wird, haftet dem Modell in diesem Punkt ebenfalls der Mangel an Konsistenz an.
- Der anomale Transport senkrecht zum Magnetfeld wird in allen drei Codes auf gleiche Weise durch einen diffusiven Transport im Realraum simuliert, wobei durchweg ein anomaler Diffusionskoeffizient in der Größenordnung $D_{\perp} \sim 1 \text{ m}^2/\text{s}$ verwendet wird.

Der Vergleich der Transport-Simulation in den drei unterschiedlichen Codes zeigt, daß dem Code DORIS in dieser Hinsicht das kompletteste und konsistenteste Mo-

dell zugrundelegt. Tests haben gezeigt, daß gerade die unterschiedliche Behandlung der Thermo-Kräfte, die fehlende $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ -Drift und die verschiedenen Grade der Näherungen für die Coulomb-Streuung, zu sowohl qualitativ als auch quantitativ stark unterschiedlichen Ergebnissen führen kann. Auf weitere Vergleiche wollen wir an dieser Stelle nicht eingehen, da den Arbeiten an den Codes ganz unterschiedliche Zielsetzungen zugrundeliegen.

Literaturverzeichnis

- [1] **Abramowitz, M. und Stegun, I. A.:**
“Handbook of Mathematical Functions“, Dover, New York (1965)
- [2] **Arnold, C.:**
„Stochastische Differentialgleichungen“, R. Oldenbourg, München (1973)
- [3] **Baelmans, M.:**
Dissertation Katholieke Universiteit Leuven, Belgium (1993) gleichzeitig “Code Improvements and Applications of a Two-Dimensional Edge Plasma Model for Toroidal Devices“, KFA-Jülich Report, Jül-2891, März 1994 (1994)
- [4] **Balescu, R.:**
Phys. Fluids 3, p. 52 (1960)
- [5] **Balescu, R.:**
“Transport Processes in Plasmas Vol. 1“, North-Holland, Amsterdam (1988)
- [6] **Bell, K. L., Gilbody, H., Hughes, J. G. et al.:**
“Atomic and Molecular Data for Fusion, Part 1“, Report CLM-R216, Culham Laboratory, Abingdon Oxfordshire (1986)
- [7] **Bogen, P., Rusbüldt, D.:**
Nuclear Fusion, Vol. 32, No. 6, p. 1057 (1992)
- [8] **Bogoliubov, N. N.:**
J. Phys. (U.S.S.R.) 10, p. 256, p. 265 (1946)
- [9] **Bohm, D.:**
in “The Characteristic of Electrical Discharges in Magnetic Fields“, ed. by A. Guthrie and R. K. Wakerung, New York (1949)
- [10] **Born, M. und Green, H. S.:**
“A General Kinetic Theory of Liquids“, Cambridge Univ. Press, London (1949)
- [11] **Bowman, A. W. und Robinson, D. R.:**
“Introduction to Statistics“, Hilger, Bristol (1987)

- [12] **Braams, B. J.:**
 "A multi fluid code for simulation of the edge plasma in tokamaks", in Net-Report EUR-FU IXII-80-87-68, Comm. of the European Communities (1987)
- [13] **Braginski, S. I.:**
 in "Reviews of Plasma Physics, Vol. I", ed. by M. A. Leontovich, Consultants Bureau, New York (1965)
- [14] **Chapman, S. und Cowling, T. G.:**
 "Mathematical Theory of Non-Uniform Gases", Cambridge Univ. Press, Cambridge (1960)
- [15] **Chen, F. F.:**
 "Introduction to Plasma Physics", Plenum Press, New York (1974)
- [16] **Claaßen, H. A., Repp, H.:**
 in "Plasma Wall Interaction", Proc. Int. Symp. Jülich (1976)
- [17] **Claaßen, H. A.:**
 Private Mitteilung (1997)
- [18] **Ecker, G.:**
 "Theory of Fully Ionized Plasmas", Academic, New York (1972)
- [19] **Eckstein, W., Garcia-Rosales, C.:**
 "Sputtering Data", Report IPP-9/82, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching (1993)
- [20] **Eidens, J. und Wolf, G. H.:**
 „Jülicher Beiträge auf dem Weg zu einem stationären Fusionsplasma in FF-ortschritte in der Energietechnik“, Festschrift für R. Schulten, Monographien des Forschungszentrums Jülich 8, Kugeler, K., Neis, H., Ballensiefen, G. (Hg.), S. 559-566 (1993)
- [21] **Feller, W.:**
 "An Introduction to Probability Theory and its Applications, Vol. II", 2. Edition, Wiley and Sons, New York (1971)
- [22] **Fisz, M.:**
 „Wahrscheinlichkeitsrechnung und mathematische Statistik“, 5. Auflage, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1970)
- [23] **Fußmann, G.:**
 „Teilchentransport in magnetisch eingeschlossenen Plasmen“ Habilitationsschrift, Universität Augsburg (1992), gleichzeitig, IPP-Report 1/273, Max-Planck-Institut für Plasma-Physik, Garching bei München (1992)

- [24] **Gardiner, C. W.:**
 "Handbook of Stochastic Methods", Springer, Berlin (1985)
- [25] **Gardner, C. S.:**
 Phys. Rev. 115, p. 791 (1959)
- [26] **Gerhauser, H. und Claaßen, H. A.:**
 "Calculation of Poloidal Rotation in the Edge Plasma of Limiter Tokamaks",
 KFA-Jülich Report, Jül-2125 (1987)
- [27] **Gondhalekar, A. et al.:**
 in "Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research Vol. I", (IAEA-CN-37/C-4), IAEA-Vienna (1979)
- [28] **Hazeltine, R. D.:**
 Plasma Phys., Vol. 15, p. 77 (1977)
- [29] **Hey, J. D. et al.:**
 Contrib. Plasma Phys. 34 (6), p. 725 (1994)
- [30] **Hinton, F. L.:**
 in "Handbook of Plasma Physics Vol. I", ed. by M. N. Rosenbluth, R. Z. Sagdeev, North-Holland, Amsterdam (1983)
- [31] **Igitkhanov, Y. L., Pistunovich, V. N., Pozharov, V. A.:**
 „Beschreibung von Randschichtplasmen mit Verunreinigungen im Rahmen eines eindimensionalen selbstkonsistenten Modells“ (in Russisch), IAE Preprint No. 4217/8, Moskau (1985)
- [32] **Gray, D.:**
 "Particle Confinement and Exhaust in Magnetically Contained Fusion Plasmas: Investigation using the Pump Limiter ALT-II with High-Power Heating in the TEXTOR Tokamak", USCD-ENG 036, University of California, Los Angeles (1996)
- [33] **Kadomtsev, B. B., Pogutse, O. P.:**
 in "Reviews of Plasma Physics, Vol. V", ed. by M. A. Leontovich, Consultants Bureau, New York (1970)
- [34] **Keijers, S., Baelmans, M., Weynants, R. R.:**
 "Studies of Carbon Impurities in TEXTOR by Means of the B2-Multi-Fluid Plasma Edge Code", Laboratory Report 105, Laboratory for Plasma Physics, Ecole Royale Militaire, Belgium (1996)
- [35] **Kirkwood, J. G.:**
 J. Chem. Phys. 14, p. 180 (1946)

- [36] **Klimontovich, Yu. L.:**
 "The Statistical Theory of Non-Equilibrium Processes in a Plasma", Pergamon, Oxford (1964)
- [37] **Kloeden, P. E., Platen, E., Schurz, H.:**
 "Numerical Solution of SDE through Computer Experiments", Springer, New York (1994)
- [38] **Knauf, H.:**
 „Numerische Modellierung von Rückstreuung und Desorption an Wandoberflächen zur Interpretation von spektroskopischen Messungen in der Plasmarandschicht von Tokamaks“, Dissertation, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf (1997)
- [39] **Kögler, U., Ulrich, J., Winter, J.:**
 "ERO TEXTOR: 3D Monte Carlo Code for Local Impurity Modeling in the Scrape Off Layer of TEXTOR", Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-3361 (1997)
- [40] **Landau, L. D.:**
 Phys. Z. Sowjetunion 10, p. 154 (1936)
- [41] **Lenard, A.:**
 Ann. Phys. (NY) 10, p. 390 (1960)
- [42] **Mathews, J. und Walker, R. L.:**
 "Mathematical Methods of Physics", W. A. Benjamin, New York (1965)
- [43] **Montgomery, D. C. und Tidman, D. A.:**
 "Plasma Kinetic Theory", McGraw-Hill, New York (1964)
- [44] **Müller, P. H.:**
 „Lexikon der Statistik“, 5. Auflage, Akademie, Berlin (1991)
- [45] **Neuhauser, J., Schneider, W., Wunderlich, R. and Lackner, K.:**
 Nuclear Fusion, Vol. 24, No. 1, p. 39 (1984)
- [46] **Nicholson, D. R.:**
 "Introduction to Plasma Theory", Wiley and Sons, (1983)
- [47] **Patankar, S. V.:**
 "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere, New York (1980)
- [48] **Rapp, J.:**
 „Ortsaufgelöste Messung der Strahlungsleistung des TEXTOR-Plasmas in einem poloidalen Querschnitt“, Dissertation, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-3172 (1996)

- [49] **Reiser, D.:**
„Eine Monte-Carlo Methode zur Untersuchung von Verunreinigungen in Tokamak Plasmen“, KFA-Jülich Report, Jül-3173, Jan.1996 (1996)
- [50] **Reiter, D.:**
“The EIRENE Code, Version: Jan. 92 User Manual“, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-2599 (1992 (a))
- [51] **Reiter, D.:**
J. Nucl. Mater. 196-198, p. 80 (1992 (b))
- [52] **Rosenbluth, M. N., MacDonald, W. M., Judd, D. L.:**
Phys. Rev. 107 (1), p. 1 (1957)
- [53] **Samm, U. et al.:**
J. Nucl. Mat. 196-198, p. 633 (1992)
- [54] **Simmonds, J. G.:**
“A Brief on Tensor Analysis“, Springer, (1995)
- [55] **Sivukhin, D. V.:**
in “Reviews of Plasma Physics, Vol. I“, ed. by M. A. Leontovich, Consultants Bureau, New York (1965)
- [56] **Sokolnikoff, I. S.:**
“Tensor Analysis, Theory and Applications to Geometry and Mechanics of Continua“ 2. Edition, Wiley and Sons, New York (1964)
- [57] **Spitzer, L. Jr.:**
“Physics of Fully Ionized Gases“, Interscience Publishers, New York (1956)
- [58] **Stangeby, P. C. and Elder, J. D.:**
J. Nucl. Mat., Vol. 196/198, p. 258 (1992)
- [59] **Takizuka, T. und Shimizu, K.:**
“Impurity Transport Code Based on Monte Carlo Techniques (IMPMC)“, ITER Workshop February 21-25, 1994, ITER JCT, Garching Co-Center (1994)
- [60] **Thompson, M. W.:**
Philos. Mag. 18, p. 383 (1969)
- [61] **Tokar', M. Z.:**
“One Dimensional Model of a Tokamak Edge Plasma under Conditions of Strong Impurity Radiation“, Berichte des Forschungszentrums Jülich, Jül-2588 (1992)

- [62] **Tokar', M. Z.:**
Private Mitteilung (1997)
- [63] **Trubnikov, B. A.:**
in "Reviews of Plasma Physics, Vol. I", ed. by M. A. Leontovich, Consultants Bureau, New York (1965)
- [64] **Van Kampen, N. G.:**
"Stochastic Processes in Physics and Chemistry", North-Holland, Amsterdam (1981)
- [65] **Weitzner, H.:**
Phys. Fluids 24 (12), p. 2280 (1981)
- [66] **Wesson, J.:**
"Tokamaks", Clarendon, Oxford (1987)
- [67] **Yvon, J.:**
"La théorie des fluides et l'équation d'état: actualités scientifiques et industrielles", Hermann, Paris (1935)

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde am Institut für Plasmaphysik des Forschungszentrums Jülich unter der Leitung von Herrn Prof. Dr. G. H. Wolf angefertigt.

Herrn Prof. Dr. G. H. Wolf gebührt mein besonderer Dank. Er ermöglichte mir die Durchführung meiner Arbeit und vertrat die Dissertation als Erstberichterstatler an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf. Seine aufmunternde Unterstützung und sein Interesse an meiner Arbeit waren für mich immer ein Ansporn zur Bewältigung der weitreichenden Aufgabenstellung.

Herrn Prof. Dr. D. Reiter danke ich für die Übernahme des Korreferates und noch mehr für die umfassende Betreuung meiner Arbeit. Ohne seinen großen Erfahrungsschatz auf dem Gebiet der Plasmaphysik und der numerischen Modellierung und seine ständige Bereitschaft, mir mit Rat und Tat zur Seite zu stehen, wäre das Gelingen dieser Arbeit nicht möglich gewesen.

Herrn Dr. Tokar' danke ich für zahlreiche wertvolle und kompetente Ratschläge, die mir halfen, eine konsistente Sicht auf das Feld der Plasmaphysik zu entwickeln.

Auch gilt mein Dank Frau Prof. Dr. M. Baelmans, sowie den Herren Dr. H. A. Claaßen, Dr. H. Gerhauser und Dr. A. Runow, die nie müde wurden, sich beharrlichen Fragen zu stellen.

Frau P. Börner und Frau T. Küppers danke ich für ihre Hilfe in allen programmtechnischen Problemen, ohne die die umfangreichen numerischen und graphischen Arbeiten nicht hätten durchgeführt werden können.

Ganz besonders bedanken möchte ich mich auch bei den Herren Dr. H. Weitzner und Dr. B. J. Braams vom Courant Institute in New York für ihre herzliche Gastfreundlichkeit. Wesentliche Impulse für meine Arbeit gewann ich aus dem wissenschaftlichen Austausch mit ihnen.

Frau B. Katt möchte ich danken für die geduldige Nachbearbeitung der vertrackten Grammatik meiner Arbeit.

Schließlich möchte ich natürlich meiner Familie danken, ohne deren Hilfe diese Arbeit nie zustande gekommen wäre.

Forschungszentrum Jülich



Jül-3508
Februar 1998
ISSN 0944-2952