



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH GmbH

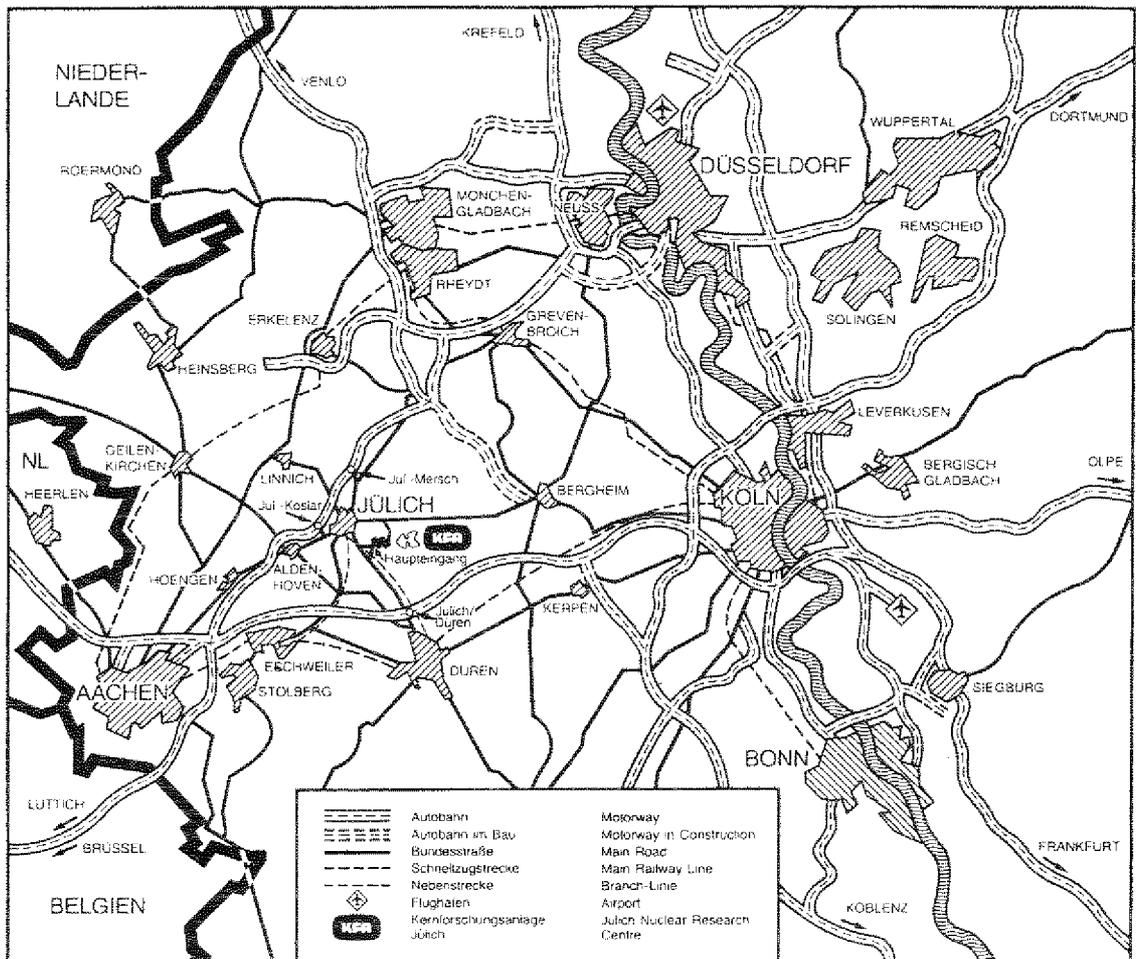
Institut für Plasmaphysik
Association EURATOM-KFA

**Randschicht-Konfiguration von Tokamaks:
Entwicklung und Anwendung
stochastischer Modelle zur Beschreibung
des Neutralgastransports**

von

D. Reiter

Jül - 1947
August 1984
ISSN 0366-0885



Als Manuskript gedruckt

Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 1947
 Institut für Plasmaphysik Association EURATOM-KFA Jülich - 1947

Zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH
 Postfach 1913 · D-5170 Jülich (Bundesrepublik Deutschland)
 Telefon: 02461/610 · Telex: 833556-0 kf d

**Randschicht-Konfiguration von Tokamaks:
Entwicklung und Anwendung
stochastischer Modelle zur Beschreibung
des Neutralgasverkehrs**

von

D. Reiter

D 10 (Diss. Uni. Düsseldorf)

ABSTRACT

Any selfconsistent modeling of the plasma in a Tokamak boundary-layer must include neutral particle effects. Important processes involving these particles are dissociation, ionization and charge-exchange. Interactions with the walls must include (ballistic) backscattering, absorption, desorption and reemission.

In general, numerical simulation and detailed analytical treatments require strong simplifying assumptions. On the other hand stochastic simulation ("Monte-Carlo"-simulation) can be done without any major approximations in the physical models, but usually at the expense of long computation times. Following the lead of neutron-transport-codes, this work takes advantage of both types of simulations by making use of "smoothing effects" on random-variables when conditional expectation values are calculated.

In this approach, a Monte-Carlo code, which keeps the dimensionality optional, has been developed, so that, depending on symmetry, one-, two- or threedimensional profiles can be computed for up to nine different neutral particle species.

The code is applied to same models, which are designed to describe the neutral gas behaviour in the Tokamaks: UNITOR (Düsseldorf), ASDEX (Garching), TEXTOR (Jülich) and JET (Culham, England).

The statistical results can be transformed numerically into data more suitable for direct comparison with experiments. For example density-profiles of exited H-atoms or charge-exchange spectra, integrated along "lines of sight" (which can be prescribed arbitrarily) can be generated.

The code indicates that in ASDEX and TEXTOR, a hot plasma core exists, evidently well separated from the cold boundary layer. However the ion temperature in this core obtained experimentally from the high energy tail

of charge exchange spectra might strongly be over- or underestimated. The error in this diagnostic depends on the position of the analyser relative to the sources of cold neutrals (limiters) located in the boundary. For example, in larger Tokamaks (JET), the neutrals emitted from the limiters lead to a charge-exchange collision frequency which can vary strongly along the line of sight. Nevertheless, the error-sources are reduced to some extent by the relatively more important volume recombination effects.

Another result of the calculations is that strong anisotropy in the neutral gas profiles in the plasma core of small Tokamaks can arise from weak neutral-plasma- interactions. Similar effects in large devices arise from strong local absorption mechanisms. In both cases this anisotropy may increase the local neutral particle energies above the mean ion energy.

ZUSAMMENFASSUNG

Zu einer selbstkonsistenten theoretischen Beschreibung der Randschicht einer Tokamakentladung gehört auch ein Modell für die Neutralgaskomponente im Plasma.

Dazu müssen atomare und molekulare Prozesse wie Dissoziation, Ionisation, Ladungsaustausch sowie Wandwechselwirkungen wie Reflexion, Desorption oder Absorption und Reemission möglichst vollständig simuliert werden.

Während numerische Simulation oft nur unter stark idealisierenden Modellannahmen möglich ist, kommt man bei stochastischer Simulation ("Monte-Carlo"-Verfahren) praktisch ohne Approximationen im physikalischen Modell aus, muß aber dafür in der Regel wesentlich größere Rechenzeiten in Kauf nehmen.

In der vorliegenden Arbeit werden mittels theoretischer Überlegungen, die sich an die Monte-Carlo-Theorie für Neutronentransportprobleme anlehnen, und die an die Stelle von sonst vorwiegend intuitiven Begründungen des Algorithmus treten, Möglichkeiten angegeben, in gewissem Umfang beide Simulationsarten zu kombinieren. Dazu wird das wahrscheinlichkeitstheoretische Konzept der bedingten Erwartungswerte eingesetzt.

Es wurde ein Monte-Carlo-Computercode entwickelt, der je nach Symmetrieverhältnissen ein-, zwei- oder dreidimensional aufgelöste Profile für mehrere Spezies neutraler Teilchen liefert. Dieser Code wird auf einige exemplarisch ausgewählte Simulationsmodelle angewendet, mit denen das Neutralgasverhalten in den Tokamaks UNITOR (Düsseldorf), ASDEX (Garching), TEXTOR (Jülich) und JET (Culham, England) nachgebildet werden soll.

Die statistischen Resultate werden zum direkten Vergleich mit experimentellen Werten numerisch weiterverarbeitet, z.B. zu Dichtepro-

filen von H-Atomen in höheren Anregungszuständen oder zu längs eines "Sehstrahls" aufintegrierten Umladungsspektren. Es zeigt sich, daß bei den Tokamaks ASDEX und TEXTOR bereits ein von der Randschicht getrenntes Kernplasma vorliegt, daß ferner aber die Bestimmung der Iontemperatur in diesem Kern mittels Ladungsaustauschanalysatoren von der Position des Analysators relativ zu den Limitern abhängige Resultate liefert. Trotz noch stärkerer Gradienten in den durch Limiterwirkung bedingten Ladungsaustauschstoßdichten verstärken sich diese Effekte bei größeren Experimenten (JET) wegen zunehmender Bedeutung der Neutralgasquelle durch Volumenrekombination allerdings nicht. Ein weiteres Ergebnis ist die Anisotropie des Neutralgasverhaltens bis ins Plasmazentrum hinein, sowohl bei sehr kleinen (wegen zu schwacher Wechselwirkung mit dem Plasma), als auch bei sehr großen Tokamaks (wegen sehr starker Absorptionsmechanismen). Dies kann in beiden Fällen dazu führen, daß lokal die mittlere Energie der Neutralteilchen deutlich über derjenigen der Ionen liegt.

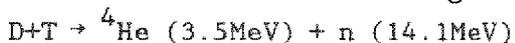
INHALTSVERZEICHNIS

0.0	Einleitung	1
1.0	Limitier- und Divertortypen	10
1.1	Limitier	11
1.1.1	poloidale Limitier	12
1.1.2	toroidale Limitier	13
1.1.3	nichtmaterielle Limitier, Ergodisierung	15
1.2	Divertoren	16
1.2.1	Poloidalfelddivertor	17
1.2.2	Bündeldivertor	18
1.2.3	Mechanische Divertoren, Hybridkonzepte	19
2.0	Plasmatransport	20
2.1	Die Transportgleichungen	20
2.2	Randschichtmodelle	23
2.3	Abschälzone, 2-D-Modelle	27
3.0	Neutralgastransport	29
3.1	Wahrscheinlichkeitstheoretische Grundlagen	30
3.1.1	Wahrscheinlichkeitsraum, Wahrscheinlichkeitsmaß, Zufallsvariable	30
3.1.2	bedingte Erwartungswerte	33
3.1.3	Stochastische Prozesse	34
3.1.4	Statistische Auswertung	37
3.2	Erzeugen von Verteilungen	39
3.2.1	beliebige Verteilungen	39
3.2.2	gleichverteilte Zufallszahlen	45
3.3	Der Stochastische Prozeß und die zugehörige Transportgleichung	46
3.3.1	Der Kaskadenprozeß	48
3.3.2	Die zugehörige Transportgleichung	56
3.3.3	Der allgemeine Monte-Carlo-Algorithmus	62
3.3.4	Anwendung auf Neutralgastransport	69
3.3.4.1	Interpretation der IGL (3.3.66)	78

3.3.4.2	Physikalische Interpretation der Konvergenzvoraussetzungen	79
3.4	Nichtanaloge Monte-Carlo-Verfahren	80
3.5	Spezielle nichtanaloge Verteilungen	83
3.5.1	Abbruchwahrscheinlichkeit	84
3.5.2	Der Stoßkern C	85
3.5.3	Der Transportkern T	86
3.6	Der geometrische Block	88
3.6.1	Allgemeine Gestalt des Blockes	89
3.6.2	1-dimensionales Flußflächengitter	90
3.6.3	Zwei- und dreidimensionale Netze	92
3.6.4	Toroidale Effekte	94
3.6.5	Limitierflächen	96
4.0	Anwendungen bei festem Plasmahintergrund	98
4.1	Standardmodelle	98
4.1.1	Quellen	101
4.1.2	Reflexionsmodelle	103
4.1.3	Stoßprozesse	108
4.2	UNITOR, toroidaler Limiter	115
4.3	ASDEX, poloidaler Limiter	126
4.4	TEXTOR, dreidimensionale Rechnungen	134
4.5	JET, nichtkreisförmiger Querschnitt	143
5.0	Zusammenfassung, Diskussion der Ergebnisse	150
A.0	Die Topologie des Zustandsraumes	153
B.0	Praktische Realisierung des Transportkerns	154
B.1	Nichtanaloger Transportkern	154
B.2	Stetig variierende Plasmaparameter	155
	Literaturverzeichnis	159

0.0 EINLEITUNG

Die stetigen Fortschritte bei der Erzeugung und Einschließung heißer Hochtemperaturplasmen in toroidalen Konfigurationen, insbesondere in Tokamaks, beruhen zu einem gutem Teil auf einer verbesserten Trennung der Randschicht des Plasmas von dessen Kern und, damit verbunden, auf einer Senkung der Verunreinigungskonzentration im Plasmakern: Strahlungsverluste durch Fremdatome sind nämlich auch ein wesentliches Hindernis auf dem Weg zu einer für den Reaktorbetrieb notwendigen positiven Energiebilanz des eingeschlossenen Plasmas. Damit die "Plasmaflamme" brennen kann, muß durch die bei Kernfusionsprozessen freiwerdende Energie sowohl der unvermeidliche Wärmeleitungs-, Diffusions- und Bremsstrahlungsverlust gedeckt werden, als auch die stark mit der Kernladungszahl Z der Fremdatome anwachsenden Strahlungsverluste durch Verunreinigungen (die Bremsstrahlung wächst mit Z^2 , die Rekombinationsstrahlung sogar mit Z^4). Hierfür stehen von der wichtigsten Reaktion:



nur die 20% der von dem α -Teilchen mitgeführten Energie zur Verfügung, da das sofort aus der Flamme entweichende Neutron nicht zur inneren Leistungsbilanz beiträgt.

Während die "Zündbedingung" (entspricht etwa dem Lawson-Kriterium /0.1/) für ein reines D-T-Plasma bei der Arbeitstemperatur eines zukünftigen Reaktors von 10keV für das Produkt aus Teilchendichte und Einschlußzeit $n \cdot \tau_E \geq 2 \cdot 10^{14} \text{ (cm}^{-3} \cdot \text{sec)}$ fordert, liegen diese Mindestwerte schon bei geringen Konzentrationen von Verunreinigungen sehr viel höher (bei 0.5% Mo zum Beispiel bei $n \cdot \tau_E \geq 5 \cdot 10^{15} \text{ (cm}^{-3} \cdot \text{sec)}$)).

Neben geeigneter Materialwahl für die Bauteile des Wandsystems (z.B. Kohlenstoff) sowie neuen Methoden der Vorbehandlung (Reinigungsentladungen, Beschichtung mit Titan) sind vor allem verschiedene Verfahren die Apertur des Plasmas und die Konfiguration der Randschicht festzulegen, vorgeschlagen und zum Teil auch schon erprobt worden.

Die Abbildung 1 bzw. Abbildung 2 zeigen schematisch einen materiell durch einen Begrenzer , "Limiter", bzw. einen magnetisch, durch einen "magnetischen Divertor" definierten Querschnitt eines Plasmas.

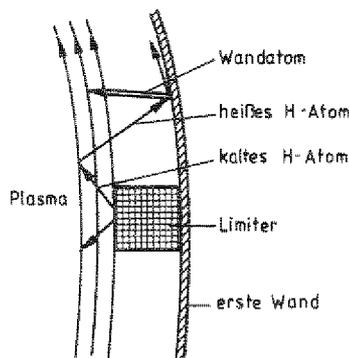


Abbildung 1. Plasmabegrenzung durch einen materiellen Limiter (schematisch) /0.1/

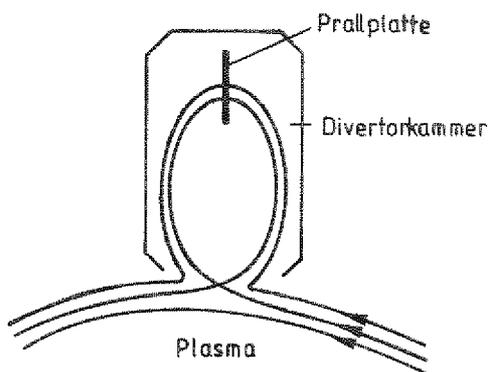


Abbildung 2. Plasmabegrenzung durch einen Divertor (schematisch) /0.1/

Magnetische Divertoren beruhen auf einer Verformung der äußeren Feldlinien durch geeignete Multipolfelder, wodurch die Kontaktzone zwischen Plasma und Wand an eine Stelle außerhalb der Brennkammer verlagert werden kann. Solche Divertoren, erstmals schon vor ca. 30 Jahren von L. Spitzer (/0.2/) vorgeschlagen, befinden sich zur Zeit in Experimenten der zweiten Generation in der Erprobung (an den Tokamaks PDX, ASDEX und DIII), nachdem in einer ersten Generation (DIVA, T12 und DITE) die grundsätzliche Wirk-

samkeit solcher Anordnungen nachgewiesen wurde (/0.3/). Mittlerweile gibt es eine umfangreiche Literatur über Divertoren (zusammenfassend in /0.3/ und /0.4/), in der neben der historisch ersten Frage nach dem Verunreinigungstransport auch weitere Probleme künftiger Reaktoren (Teilchen- und Energieabzug, Reaktor-Kontrollfunktionen, Brennstoffzufuhr) untersucht werden.

Neueren Datums und experimentell nur teilweise erprobt sind Vorschläge, die natürliche Unvollkommenheit des einschließenden Magnetfeldes in der Randschicht (beispielsweise wegen der "Rippleeffekte" durch die toroidal diskret verteilten Magnetspulen) auszunutzen und sogar noch zu verstärken ("Magnetfeldergodisierung"). Dabei soll ein kalter dichter "Plasmamantel" erzeugt werden, der einerseits den heißen Kern gegen von außen eindringende Fremdatome abschirmt, und der andererseits in seiner wärmedämmenden Wirkung eingeschränkt ist und auf diese Weise ("Konvektionskühlung") den Teilchen- und Wärmestrom großflächig und damit dann in tolerierbarer Stärke auf der Gefäßwand verteilt (/0.11/-/0.14/). Auch Kombinationen dieser Magnetfeldverwirbelung mit dem Limiterkonzept ("Abschälllimiter") sind vorgeschlagen worden (/0.15/, /0.16/), um so mit technisch möglicherweise geringerem Aufwand als mittels Divertoren für einen Abzug (Auspuff) der Helium-Asche und der Verunreinigungen aus der Randschicht zu sorgen.

Das Programm des Institutes für Plasmaphysik der Kernforschungsanlage Jülich ist auf das Problem der Plasma-Wand-Wechselwirkung konzentriert und umfaßt damit auch die systematische Untersuchung von Möglichkeiten zur Beherrschung der Plasma-Randschicht. Das Plasma für die Experimente wird von einem Tokamak: TEXTOR (Tokamak Experiment for Technology Oriented Research) bereitgestellt, der zur gleichen Größenklasse wie die Tokamaks PLT (Princeton) und ASDEX (Garching) gehört (großer Radius $R = 175$ cm, kleiner Radius $a = 50$ cm, Plasmastrom $I_p = 500$ kA, $n_e \approx 3 - 6 \cdot 10^{13}$ cm⁻³, Temperatur $T = 0.4 - 1.5$ keV (ohne Zusatzheizung), Pulsdauer $\tau = 2$ sec) und der hauptsächlich als Teststand für die Brennkammerentwicklung ausgerichtet ist.

Es gibt heute nur eine qualitative Definition der "Randschicht" eines Plasmas, man versteht darunter jene Zone, die stark von der Wechselwirkung

mit Neutralgas beeinflusst ist. Neutrale Atome und Moleküle gelangen von außen in diese Schicht durch Gaseinlaß, und sie bilden sich an den Kontaktstellen von Plasma und Wand. Ihr Verhalten ist von Interesse für den Brennstoffkreislauf, für die Wirksamkeit der Teilchenabfuhr und für die Funktionen von Bauteilen der Brennkammer. In dieser Arbeit wollen wir als Randschicht die Zone definieren, in der die Neutralgasdichte n_0 von ihrem Wert am Rand $n_0(a)$ in radialer Richtung, also auf das Plasmazentrum zu, auf rund ein Prozent abgefallen ist. Der Hauptteil der Dissoziations- und Ionisationsprozesse findet dann in der Randschicht statt. Damit eine Trennung dieser Schicht vom Plasmakern möglich ist, muß bei typischen Plasmaparametern in dieser Zone ($n \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $T \approx 10 - 100 \text{ eV}$) das Plasma eine Mindestgröße haben, für das Produkt aus mittlerer Teilchendichte \bar{n} und kleinem Radius a ergibt sich ungefähr $\bar{n} \cdot a \geq 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

Durch Umladungsprozesse kann darüber hinaus ein Teil der Neutralteilchen bis in den Plasmakern vordringen und von dort mit fast Plasmatemperatur ungehindert durch das Magnetfeld wieder aus dem Plasma herausfliegen. Dies ist von Interesse für die Bestimmung der Ionentemperatur im Kern, aber auch für die Energiebilanz. Bei den mit Hilfe eines "Poloidalfelddivertors" erzielten sehr reinen Entladungen im Tokamak ASDEX (effektive Kernladungszahl $z_{\text{eff}} \approx 1$) stammt der Hauptteil der in der Entladungskammer bolometrisch gemessenen "abgestrahlten" Leistung von solchen Umladungsneutralen (/1.1/). Der wesentliche Beitrag kommt dabei trotz der niedrigen Energie der Teilchen bei Tokamaks dieser Größe aus dem äußeren Drittel des Plasmas.

Die Neutralgasprofile weisen außer in radialer Richtung je nach Symmetrie der Quellen für Neutralteilchen, also je nach Limiter- oder Divertortyp, auch in poloidaler (also längs des kleinen Torusumfangs) und/oder in toroidaler (längs des großen Umfangs) Richtung starke Abhängigkeiten vom Abstand zur Quelle auf. Bei einer Interpretation experimenteller Ergebnisse muß dem Rechnung getragen werden. Zur theoretischen Unterstützung der Versuche werden deshalb am Institut für Plasmaphysik in Jülich auch numerische Tokamaksimulationen durchgeführt, insbesondere, um die mehr integralen experimentellen Ergebnisse am realen System einigermaßen interpretierbar zu machen, indem man beispielsweise vielerlei unstrittige atomare und molekulare Prozesse rechnerisch eliminiert und von dem unbe-

kannten Plasmatransport isoliert. Solche Simulationen, also Untersuchungen des Verhaltens einzelner Parameter mit Hilfe eines Ersatzsystems (im engeren Sinne: unter Benutzung mathematischer Modelle) erfordern in der Regel beträchtliche Anpassungsarbeit (hier: an die Bedingungen des speziellen Tokamakexperiments), was nicht selten dazu führt, daß Computerprogramme nur für ein spezielles Experiment brauchbar sind.

Der Hauptteil der vorliegenden Arbeit dient der Entwicklung und Erprobung von speziell stochastischen ("Monte-Carlo"-) Simulationsverfahren zur Untersuchung des Verhaltens der neutralen Komponente, die hinreichend allgemein sind, um auch bei komplexen Divertor- und Limitergeometrien anwendbar zu sein, und die über einen großen Bereich von Plasmaparametern ökonomisch (das heißt mit nicht zu großen statistischen Schwankungen um den Mittelwert) arbeiten.

Dementsprechend (siehe Kapitel 4) liefern die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit nicht nur generelle Einsichten über den Ablauf und die charakteristischen Eigenschaften einer Tokamak-Entladung unter verschiedenen Randbedingungen, sie dienen darüber hinaus der Bewertung von Bauteilen zur Beherrschung der Randschicht und der Plasma-Wand-Wechselwirkung. Außerdem liefern sie Hilfsmittel zur Interpretation experimenteller Ergebnisse wie Ladungsaustausch-Spektroskopie, H_{α} -Spektroskopie, Druckanstiegsmessungen in Pumplimiterexperimenten, Leistungsbilanz durch Bolometrie etc.

0.1 TRANSPORTTHEORIE

Transportgleichungen beschreiben die zeitliche und räumliche Entwicklung von Dichten und Temperaturen unter anderem durch Diffusion und Wärmeleitung und unter dem Einfluß von äußeren und inneren Quellen und Senken. Es sind Momentengleichungen der kinetischen Gleichungen (Boltzmann-Gleichung).

Durch gegenseitige Beeinflussung von Plasma und einschließendem Magnetfeld kommt es zu einem stark anisotropen Verhalten der geladenen Teilchen,

die auf Bahnen im Wesentlichen entlang der Feldlinien gezwungen werden. Weil deshalb Diffusion und Wärmeleitung für Ionen und Elektronen längs der magnetischen Feldlinien (zumindest im Plasmakern) sehr viel größer sind als senkrecht dazu, sind die Plasmaparameter auf den Flächen konstanten magnetischen Flusses in einem Tokamakplasma praktisch konstant. Man vereinfacht deshalb hier die Transportgleichungen zu eindimensionalen Gleichungen, deren einziger Parameter eine Größe ρ ist, die die Flußflächen indiziert (wegen der notwendigen Korrekturen an diesem Modell für die "scrape-off layer" siehe Kapitel 2.3).

Anders ist die Situation bei der neutralen Komponente. Da es keine Vorzugsrichtung gibt, bleiben die Transportgleichungen dreidimensional.

Bei einer integralen Beschreibung von Plasma- und Neutralgastransport gehen zwar in die Plasmatransportgleichungen nur die über Flußflächen gemittelten Quellen und Senken ein, um aber Aussagen über das Neutralgas selbst zu machen, muß man dem dreidimensionalen Verhalten Rechnung tragen.

Wegen eines weiteren wesentlichen Unterschieds beschränken wir uns in dieser Arbeit auf Simulationsmethoden für die neutrale Komponente in einem endlichen Volumen, in dem es bei Anwesenheit eines Mediums (hier: Plasma) zu Stößen kommen kann, die Methoden können aber auch für Fragen der Gasdynamik (im "Knudsen-Bereich", also bei großen freien Weglängen für Stöße der Neutralteilchen untereinander verglichen mit den Gefäßdimensionen) eingesetzt werden.

Durch Stoßprozesse wird für die Teilchengeschwindigkeiten ein Zufallsprozeß im Geschwindigkeitsraum definiert. Die Trajektorien werden als "Zufallsspazierwege" (engl.: "random walks") bezeichnet. Sie sind bei neutralen Teilchen Sprungfunktionen, da die Umladungsstöße und Dissoziationsprozesse Weitwinkelstöße sind und die Zeiten zwischen zwei Stößen nicht klein sind gegenüber einer charakteristischen Zeit Δt , in der sich die Verteilungsfunktion ändert. (Gemeint ist die bedingte Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(\mathbf{x}_0, t \rightarrow \mathbf{x}, t+\Delta t)$ für den Zustand \mathbf{x} , in den ein Teilchen nach Verstreichen der Zeit Δt , ausgehend von \mathbf{x}_0 , übergeht.) Dagegen tragen bei geladenen Teilchen in einem charakteristischen

Zeitintervall sehr viele Kleinwinkelstöße (Coulomb-Stöße) kumulativ zu einer merklichen Änderung der Geschwindigkeit bei, so daß man auf Grund der analytischen Eigenschaften der Trajektorien hier von einem stetigen- oder "Diffusions"-Prozeß spricht.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten werden analytisch durch ein Paar von zueinander adjungierten "Vorwärts- und Rückwärtsgleichungen" festgelegt, die Vorwärtsgleichung bei Diffusionsprozessen heißt auch "Fokker-Planck-Gleichung" und dient in der Plasmatransporttheorie zur Berechnung von Diffusions- und Wärmeleitkoeffizienten (/2.6/). Bei der Lösung mit stochastischen Methoden wäre hier ein stetiger Prozeß (wie etwa auch bei Simulationen des Brownschen Bewegungsprozesses) im Rechner nachzubilden, für den Neutralgastransport ist ein unstetiges Modell zu verwenden, was andere Methoden nötig macht.

0.2 MONTE-CARLO-VERFAHREN

* Ein Algorithmus zur Berechnung einer Größe I ist ein "Monte-Carlo-Verfahren", wenn die Zahl I als Parameter einer Wahrscheinlichkeitsverteilung (zum Beispiel der Erwartungswert) aufgefaßt wird und dann mit statistischen Methoden geschätzt wird. Für Monte-Carlo-Computercodes heißt das, daß in der Aufgabe auftretende Zufallsvariable durch aktuelle Zufallszahlen mit gleichem Verteilungsgesetz ersetzt werden.

Obwohl in der numerischen Mathematik oft für streng deterministische Aufgaben erst ein stochastisches Modell konstruiert wird, sind solche Methoden insbesondere dann naheliegend, wenn wie hier beim Neutralgastransport die Aufgabe unmittelbar eine wahrscheinlichkeitstheoretische Beschreibung gestattet.

Der Vorteil solcher stochastischer Methoden gegenüber analytischen oder numerischen Verfahren ist, daß man praktisch ohne Approximation im physikalischen Modell auskommt, und daß es wegen des "Gesetzes der großen Zahlen" (siehe 3.1.4) auch keine Konvergenzprobleme gibt. Dem stehen allerdings in der Regel sehr viel größere Rechenzeiten gegenüber. Außerdem ist die Güte der statistischen Auswertung bei Aussagen, die ein Teilgebiet des betrachteten Volumens betreffen, abhängig von der Zahl der

Teilchenbahnen durch dieses Gebiet und hängt damit stark von der Geometrie des Gefäßes und von den Plasmaparametern ab.

Um dennoch die angestrebte Allgemeinheit des Algorithmus zu erzielen, versuchen wir nicht wie sonst bei Neutralgas-Monte-Carlo-Codes für Tokamaksimulationen üblich, das physikalische Modell möglichst genau im Rechner nachzubilden. Wir benutzen dagegen die breite theoretische Basis, die für die in großer Zahl entwickelten Neutronentransportcodes der Kernreaktorphysik entwickelt wurde, um mit deren Hilfe jede Art von "phänomenologischen Vorgehen" durch einen exakten Kalkül zu ersetzen. Besonders große Flexibilität wird dadurch erreicht, daß nicht mehr unbedingt der physikalische Modellprozeß simuliert wird, sondern ein anderer "nichtanaloger" Prozeß, der nach ökonomischen Gesichtspunkten ausgewählt wird, der aber, wie unter der Benutzung der Boltzmanngleichung und wahrscheinlichkeitstheoretischer Methoden nachgerechnet wird, die gleichen Resultate ergibt.

In dieser Arbeit werden einige Umformulierungen dieser Theorie für die (in der Regel aus Teilchen verschiedener Spezies bestehende) Neutralgaskomponente vorgenommen, es werden einige speziell für hier interessierende Plasma-Randschicht-Probleme relevante Schätzfunktionen (das heißt: Methoden zur Auswertung der Stichproben) und nichtanaloge Prozesse angegeben und es wurde ein allgemeiner Monte-Carlo-Code entwickelt, in dem diese Verfahren Verwendung finden.

In dem theoretischen Kapitel 3 dieser Arbeit wird dies beschrieben. Wir leiten dort aus dem physikalischen Modellprozeß (der wegen möglicher Dissoziationsereignisse ein Kaskadenprozeß ist) einen als "mathematisches Modell" bezeichneten einfach nachzubildenden Prozeß (eine "Markov'sche Kette") ab und eine Transportgleichung (Boltzmanngleichung in integraler Form). Die Pfade des Prozesses werden maschinell mit Hilfe von Zufallszahlen generiert, und die Auswertung der Testflüge geschieht dann ähnlich wie in den Neutronentransportcodes. Wir berechnen mit Hilfe der Transportgleichung den Erwartungswert, gegen den der Algorithmus konvertiert. Dazu benutzen wir implizit den zentralen Begriff aus der Maßtheorie der " σ -Algebra", um auf Möglichkeiten hinzuweisen, wie das Verhältnis von Statistik zu analytischem Vorgehen in einem Monte-Carlo-Code zugunsten

der einen oder anderen Seite verschoben werden kann. Im theoretischen Grenzfall kann so ein Monte-Carlo-Algorithmus in ein streng analytisches Verfahren übergehen. Auch im hier beschriebenen Rechencode kann in gewissem Umfang gewählt werden, da jede Größe (z.B. Druck, Dichte, Temperatur) auf drei Arten mit unterschiedlichen statistischen und analytischen Anteilen berechnet werden kann.

Zuvor werden in den Kapiteln 1 und 2 die konkreten Fragestellungen formuliert, die mit dem Monte-Carlo-Verfahren bearbeitet werden sollen. In Kapitel 1 geben wir einen Überblick über die Konzepte zur Beeinflussung der Plasmarandschicht (Limiter, Divertor, kalter Plasmamantel). In Kapitel 2 werden die in den Plasmatransportcodes verwendeten Methoden kurz zitiert und die Verknüpfungspunkte mit dem Neutralgastransport herausgestellt. Nachdem dann (Kapitel 3) das verwendete Verfahren beschrieben ist, wird in Kapitel 4 zunächst durch Vorgabe fester Quellenverteilungen, fester Reflexionsmodelle und der verwendeten Stoßraten das zu Grunde liegende physikalische Modell fixiert. Außerdem werden dort Ergebnisse von Rechnungen (bei festem Plasmahintergrund) angegeben und diskutiert, denen Parameter zugrundeliegen, wie sie in den Tokamaks UNITOR, ASDEX, TEXTOR und JET vorliegen bzw. erwartet werden. Im abschließenden Kapitel 5 werden die Ergebnisse und Methoden zusammenfassend diskutiert und einige Schlußfolgerungen angeführt.

1.0 LIMITER- UND DIVERTORTYPEN

Die "Teilchen- und Energieflüsse" (also die über die exponierten Flächen integrierten "Flußdichten") in Tokamaks der derzeitigen Größenordnung (ASDEX, TEXTOR, ISX, PLT), denen die Brennkammern oder einzelne Bauteile davon ausgesetzt sind, liegen in der Größenordnung von 10^{21} Teilchen/sec bzw. 0.1 - 10 MW. Diese Werte steigen in den großen Tokamaks der nächsten und übernächsten Generation (JET, TFTR, oder INTOR) um 1-2 Größenordnungen. Ob und wie diese Wandbelastungen beherrscht werden können, ohne daß sich Verunreinigungen oder Helium in zu hoher Konzentration im heißen Kern des Plasmas ansammeln, hängt mit vom Design der Brennkammer ab.

Der Sprachgebrauch bei der Bezeichnung verschiedener Randschichtkonzepte ist nicht einheitlich. Im weiteren sprechen wir immer dann von einem "Limiterkonzept", wenn es einen geschlossenen Kreislauf gibt zwischen dem (durch Diffusion oder Strömung) auf die dafür vorgesehenen Bauteile der Brennkammer treffenden Teilchenfluß und den reflektierten oder desorbierten, überwiegend neutral vorliegenden Teilchen, die in der Randschicht dann wieder ionisiert werden (100% Recycling). In der Praxis muß dazu der Teil des abströmenden Plasmas, der absorbiert wird, extern wieder zugeführt werden. Im Gegensatz dazu wird bei einem "Divertorkonzept" ein Teil des Teilchenflusses umgeleitet (aus der Brennkammer heraus bei einem "geschlossenen Divertor"), um dann an geeigneter Stelle abgepumpt werden zu können. "Abschäl- und Pumplimiter" sind demnach (mechanische) Divertoren, der Kaltgasmantel und der Kaltplasmamantel (erzeugt durch Strahlungskühlung oder Konvektionskühlung mittels Magnetfeldergodisierung) sind Beispiele für nichtmaterielle Limiter.

Materielle Limiter, wie sie in den meisten Tokamaks bisher zur Kontrolle der Plasma-Wand-Wechselwirkung eingesetzt wurden, stellen, verglichen mit magnetischen Divertoren, eine größere Quelle schwerer Verunreinigungen dar und werden deshalb vermutlich nur in Verbindung mit einer kalten Randschicht, einem nichtmateriellen Limiter, in den nächsten größeren Tokamaks das geeignete Mittel sein. JET, TFTR und T15 beruhen auf solchen Konzepten, für JT-60 und INTOR sind Poloidalfelddivertoren vorgesehen. Es

ist beim derzeitigen Stand der Kenntnis nicht möglich vorherzusagen, welches Konzept für einen künftigen Reaktor ausreichend, mit den anderen Bedingungen verträglich und technisch machbar sein wird.

1.1 LIMITER

Alle Bauteile der Brennkammer, an denen das Plasma Kontakt mit der Wand hat, sind Senken für die auftreffenden Ionen und Elektronen sowie für die von ihnen getragene innere Energie. Auf Grund unterschiedlicher mittlerer Geschwindigkeiten kommt es in der Nähe der Kontaktzone zu Ladungstrennung und der Ausbildung eines Potentials derart, daß der Nettoladungsfluß auf den Limiter Null wird. Die Quelle für Neutralteilchen ist durch mit Rekombination verbundener Reflexion der auftreffenden Ionen gegeben, sowie durch die Rekombination und anschließende Desorption von Atomen in der Oberfläche des Festkörpers zu Molekülen.

Erstgenannte Quelle hängt über die Verteilungsfunktion der Ionen an der Wand von den Plasmaparametern in der Randschicht und dem elektrischen Raumladungsfeld vor der Kontaktfläche ab, letztgenannte von der Konzentration und dem Diffusionsverhalten des Wasserstoffs in der Wand.

Diesem und der unterschiedlichen Geometrie der einzelnen Limitertypen tragen wir im theoretischen Neutralgasmodell durch frei wählbare Quellenverteilungsdichten (siehe 4.1.1) Rechnung. In Abbildung 3 auf Seite 12 sind unter dem geometrischen Gesichtspunkt einige Limiter- und Divertoranordnungen gegenübergestellt.

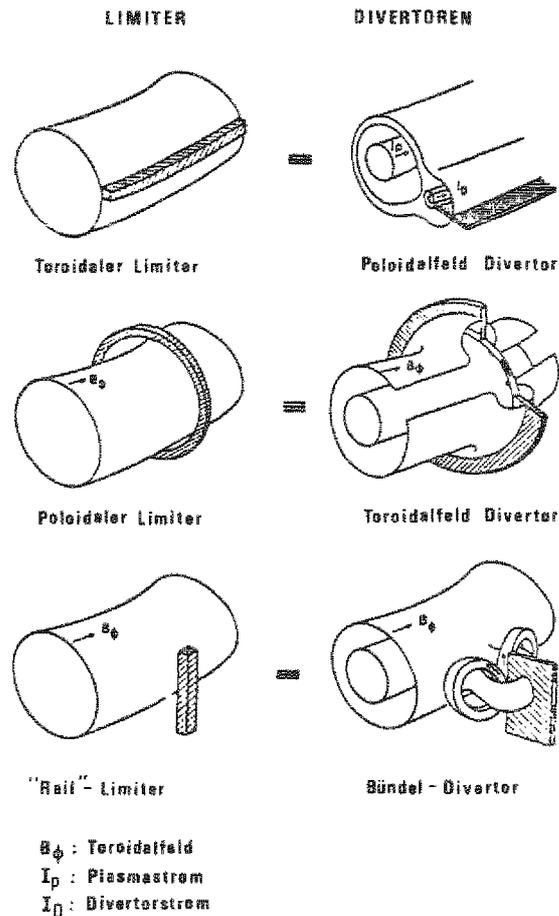


Abbildung 3. Limiter- und Divertortypen: Vergleich hinsichtlich der Symmetrieverhältnisse

1.1.1 POLOIDALE LIMITER

Ein poloidaler Limiter umschließt den Torus längs des kleinen Umfangs in einer lokalen toroidalen Position. In der Praxis spricht man schon dann von einem poloidalen Limiter (z.B. bei ASDEX während sogenannter "L-Entladungen" /1.5/), wenn ein wesentlicher Teil des poloidalen Umfangs gleichmäßig zur Plasmabegrenzung beiträgt.

Die charakteristische Länge Δ , in der die Plasmatemperatur von Limiterinnenkannte nach außen (in den "Limiterschatten") abfällt (ca. 1-2 cm) bestimmt die Größe der Kontaktzone und damit die lokale Leistungsdichte auf der Limiteroberfläche. Ist P die vom Limiter pro sec aufzunehmende Wärme und soll keine größere Exposition als 700 W/cm^2 stattfinden, so ergibt sich bei senkrechtem Auftreffen der Feldlinien und wenn beide Seiten des Limiters beaufschlagt werden, wegen

$$P/2\pi a \cdot 2 \cdot \Delta \leq 700 \text{ W/cm}^2$$

für einen kleinen Radius $a = 100 \text{ cm}$ und $\Delta = 2 \text{ cm}$ für die Leistung P die Bedingung: $P \leq 2 \text{ MW}$.

Die aufzunehmenden Leistungen in Tokamaks der nächsten Generation sind demnach für solche lokalen poloidalen Limiter zu groß.

1.1.2 TOROIDALE LIMITER

Durch geeignete Oberflächenform der Limiter kann erreicht werden, daß der Winkel der Feldlinien gegen die Oberflächennormale kleiner und damit die belastete Fläche größer wird. Das Gleiche wird auch durch eine längs des großen Umfanges umlaufende Plasmabegrenzung erreicht. ("Toroidaler Limiter") /1.7/.

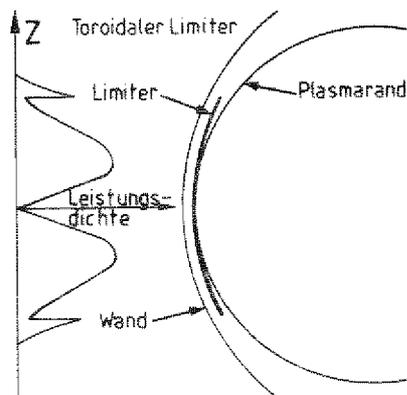


Abbildung 4. Einfluß der Form des Limiters auf die Leistungsdichte
/1.8/

Durch die gekrümmte Form des in Abbildung 4 auf Seite 13 gezeigten Limiters (Krümmungsradius größer als derjenige der Flußlinien) kann die Wärmebelastung auf 5% des Wertes für senkrechten Einfall gesenkt werden und kommt damit auch für die Tokamaks der nächsten Generation in tolerierbare Bereiche (/1.8/). Die gezeigte z-Abhängigkeit der Leistungsdichte ist in /1.8/ unter der Annahme einer exponentiellen Abnahme des Wärmestroms parallel zum Feld in der Abschälzone durch ein rein geometrisches Argument ermittelt. Numerische Untersuchungen /1.17/, /2.21/ unter Berücksichtigung der Einflüsse der sich ausbildenden elektrostatischen "Debye-Schicht" vor der Platte bestätigen den gezeigten Verlauf aber zumindest qualitativ.

Das Plasma in UNITOR (/4.4/) wird z.B. auf diese Weise begrenzt, hier wirkt ein Teil der äußeren Gefäßwand, gegen den sich das Plasma "anlehnt", als toroidaler Limiter. An ASDEX (/1.5/) wird zeitweise die untere Divertorkammer durch einen toroidalen Limiter abgedeckt, die beobachteten Eisenkonzentrationen ($5 \cdot 10^{-4}$) lagen aber genauso hoch wie bei Entladungen mit poloidalem Limiter (und etwa 25 mal höher als bei Divertorentladungen).

Tragen abgesehen von "Sicherheitslimitern" wie bei TEXTOR oder JET nur einzelne diskret angeordnete Bauteile zur Plasmabegrenzung bei, so sind zur theoretischen Beschreibung anstelle der für oben angeführte Fälle ausreichenden 2-D-Modelle nun dreidimensionale Rechnungen nötig, wenn nicht diese Limiter doch so dicht auf dem kleinen oder großen Torusumfang angeordnet sind, daß man Abfallängen der Neutralgasprofile in der entsprechenden Richtung vernachlässigen könnte.

Dieses zu entscheiden ist mit dem in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Monte-Carlo-Algorithmus möglich, weil der Grad an Ortsauflösung eine wählbare Option geblieben ist.

1.1.3 NICHTMATERIELLE LIMITER, ERGODISIERUNG

Experimentelle und theoretische Ergebnisse lassen vermuten, daß es gelingen kann, z.B. durch Beimengen von geeigneten Fremdstoffen, eine starke Wärmestrahlung (Strahlungskühlung) aus der Randschicht zu gewährleisten.

Ein auf diese Weise entstehender Kaltplasmamantel, der den heißen Kern umhüllt, ist durch eine kritische Temperatur T_c (1 - 100 eV) definiert ($T < T_c$ in dieser Schicht). T_c ist bestimmt durch die Forderung (/1.10/), daß die Plasma-Wand-Wechselwirkung (Sputtering, Unipolarbögen, etc.) in tolerierbaren Grenzen bleibt, und daß sowohl die von der Wand kommenden Neutralteilchen hier ionisiert werden, als auch die heißen aus dem Kern kommenden Umladungsneutralen moderiert werden. Ist Δ die Dicke dieser Schicht, so muß $n \cdot \Delta \geq 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (n ist die Plasmadichte) gelten (loc.cit.), damit die Eindringtiefe λ für neutralen Wasserstoff (bei Energien ≈ 10 eV) kleiner als Δ ist.

Das Gleiche gilt auch für das Konzept des Helischen Magnetischen Limiters (/0.11/-/0.14/). Der Unterschied besteht darin, daß durch zusätzliche äußere helikale Magnetfelder kurzer Reichweite, die mit kleinen Strömen ($\approx 10^{-2} \cdot I_p$, I_p ist der Plasmastrom) erzeugbar sind, ein mittlerer Einfallswinkel ε ($0 < \varepsilon < 10^{-3}$) der Feldlinien der Randschicht gegen die Gefäßwand eingestellt wird, so daß freies thermische Abströmen des Plasmas möglich ist. Man verspricht sich von diesem Konzept:

1. verstärkte Kühlung der Randschicht durch Konvektion,
2. verbesserten Teilchenabzug (eventuell durch Kombination mit einem mechanischen Divertor, siehe 1.2.3),
3. verbesserte Abschirmung von Verunreinigungen und
4. verbesserte Gleichverteilung der Wärmebelastung.

Für eine numerische Berechnung des Neutralgasverhaltens in der sich ausbildenden schützenden Randschicht ist eine möglichst exakte Behandlung

der atomaren und molekularen Prozesse nötig. In dieser Schicht wirken Dissoziationsprozesse für Moleküle, ebenso wie Umladungsstöße der Atome wie ein teilweiser Reflexionsprozeß für Neutralteilchen, die von der Wand kommen, und die auf diese Weise zwischen Randschicht und Wand mehrfach reflektiert werden, unter Oberflächenrekombination der Atome zu Molekülen und Dissoziation der Moleküle zu Ionen und Atomen.

Für das angewendete statistische Verfahren ist dabei von Bedeutung, daß gleichzeitig statistisch gute Resultate aus sehr häufigen Ereignissen (Stöße in der Randschicht oder mit der Wand) und auch aus sehr seltenen Ereignissen (Eindringen heißer Umladungsneutraler von innen her in die Randschicht) erhalten werden sollen. Dies macht die im Kapitel 3 dieser Arbeit durchgeführte theoretische Begründung des Monte-Carlo-Verfahrens anstelle einer sonst als ausreichend angesehenen mehr phänomenologischen Simulation nötig.

1.2 DIVERTOREN

Durch einen Divertor wird ein wesentlicher Teil der Plasma-Wand-Wechselwirkung nach außerhalb des eigentlichen Entladungsgefäßes verlegt. Damit ist eine geringere Konzentration von Verunreinigungen in der Entladung verbunden, weniger wegen einer Abschirmwirkung als durch die Verlagerung der Quellen. Die Konzentration der Plasma-Wand-Wechselwirkung an den Prallplatten von Divertoren durch das Strömen eines Teils des Plasmas längs der umgeleiteten Feldlinien bewirkt in der Divertorregion einen hohen Neutralgasdruck ($\geq 10^{-3}$ Torr), was in künftigen Experimenten und Reaktoren für das Abpumpen der Heliumasche günstig ist. Darüberhinaus ist die Kontrolle von Plasmalage und Form (zur Vermeidung von Wandkontakten) weniger kritisch, solange in der Divertorregion die magnetische Konfiguration einen auf den Prallplatten lokalisierten Wandkontakt gewährleistet.

Trotzdem ist es ein Ziel der Tokamakentwicklung, Divertoren wegen der mit ihnen verbundenen größeren technologischen Schwierigkeiten möglichst

überflüssig zu machen. Einige Typen magnetischer Divertoren sind in Abbildung 3 auf Seite 12 skizziert. Toroidalfelddivertoren scheiden auf Grund verschiedener Nachteile als brauchbares Konzept aus.

Nachteilig sind z.B. der Platzbedarf auf der Torusinnenseite, die großen zu erzeugenden Feldstärken gegen das Toroidalfeld, der Verlust der Axialsymmetrie oder die negativen Effekte auf den gesamten Teilcheneinschluß.

1.2.1 POLOIDALFELDDIVERTOR

Derzeit am weitesten ist das Konzept des Poloidalfelddivertors entwickelt. Anstelle einer geschlossenen Divertorkammer, wie z.B. in ASDEX, muß auf Grund des notwendigen großen Abstandes der Poloidalfeldspulen vom Plasma in einem künftigen Reaktor eine offene Geometrie (wie z.B. in Doublet III) gewählt werden (d.h. die Prallplatten werden nicht mehr durch die Ummantelung der Divertorspulen geometrisch vom Hauptplasma abgeschirmt sein können). Der wesentliche Unterschied zum Limiterkonzept ist dann die Tatsache, daß die Apertur des Plasmas nun magnetisch und nicht durch Wandkontakt definiert ist.

Wesentliche Vorteile dieses Konzeptes gegenüber dem des Bündeldivertors (siehe 1.2.2) sind, daß die Axialsymmetrie erhalten bleibt, daß ferner auch elliptische oder D-förmige Plasmaquerschnitte möglich sind und daß nur kleinere Ströme in den Poloidalfeldspulen nötig sind um das schwächere Poloidalfeld lokal aufzuheben. Bedingt durch die offene Geometrie sind aber große Rückflüsse durch den Divertorhals ins Plasma möglich, weshalb insbesondere in Bezug auf die Abschirmung des Hauptplasmas vor Verunreinigungen aus dem Divertorbereich bei diesem Konzept die Unsicherheiten in der Extrapolation derzeitiger Experimente auf Reaktorparameter liegen. Wesentlich wird es sein, durch starkes Neutralgasrecycling vor den Prallplatten eine hohe Plasmadichte und eine geringe Plasmatemperatur (ca. 10-20 eV) zu erreichen.

1.2.2 BÜNDELDIVERTOR

Wie auch Abbildung 3 auf Seite 12 zu entnehmen ist, ist ein Bündeldivertor ein lokaler Toroidalfelddivertor (/1.11/-/1.14/). Dieser Divertor hat eine sehr geschlossene Geometrie. Der geometrische Eintrittsbereich in den Divertor ist ein bis zwei Größenordnungen kleiner als beim Poloidalfelddivertor. Daraus resultiert vernachlässigbares Zurückströmen aus dem Divertor, das einströmende Plasma wirkt wie eine effektive Diffusionspumpe für Neutralgas. Deshalb kann sich insbesondere bei diesem Konzept in der Divertorkammer ein kaltes dichtes Gastarget aufbauen, was möglicherweise sogar die Prallplatten ersetzen kann.

Die Dicke der Abschälzone, in der die Flußflächen durch die Divertorwirkung keine geschlossenen Tori mehr sind, ist durch eine Bilanz zwischen Diffusion senkrecht zum Magnetfeld und Strömen längs der Feldlinien in den Divertor bestimmt. Diese Schicht ist beim Bündeldivertor dicker (etwa doppelt so dick) als beim Poloidalfelddivertor, weil die Teilchen im erstgenannten Fall den Torus in der Randschicht mehrmals umlaufen müssen, bevor sie, bedingt durch die Rotationstransformation der Feldlinien, in den Divertor gelangen, und weil ferner ein starker magnetischer Spiegel im Divertorhals das Strömen des Plasmas in die Pumpkammer behindert. Dies würde eine weniger gute Ausnutzung des Brennkammervolumens für einen Reaktor bedeuten. Andererseits hat ein Bündeldivertor einen wesentlich geringeren Platzbedarf und ist vermutlich leichter zu warten. Die Unsicherheiten in der Extrapolation auf künftige Reaktoren sind hier zu einem guten Teil durch die notwendigen großen Stromdichten in den Divertorspulen und die hierdurch auftretenden mechanischen Kräfte bedingt.

1.2.3 MECHANISCHE DIVERTOREN, HYBRIDKONZEPTE

Abschälllimiter (Particle Scraper, /1.8/)

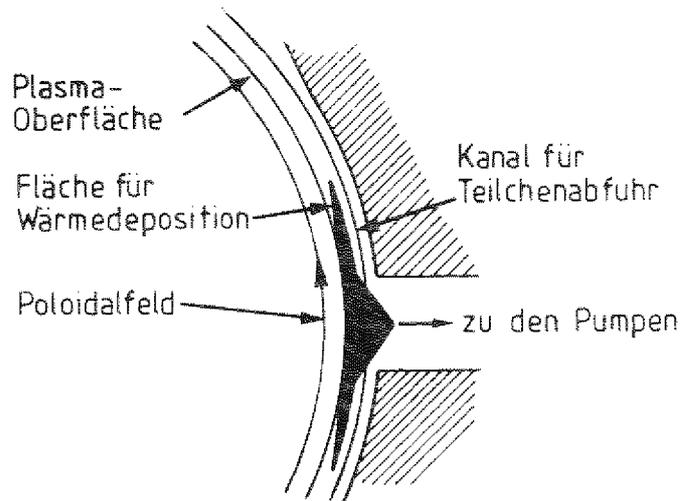


Abbildung 5. Mechanischer Divertor (Pumplimiter): Ausnutzen unterschiedlicher Abfallängen für Teilchen- und Energiefluß

Abbildung 5 zeigt schematisch einen Abschälllimiter, nach oben getroffener Vereinbarung einen mechanischen Divertor. Durch die spezielle Formgebung (unter Berücksichtigung der für Dichte größeren Abfallänge verglichen mit derjenigen für Temperatur in der Randschicht) wird der Teilchenstrom in eine Absaugöffnung umgeleitet. Die besonders exponierte und schlecht kühlbare Kante kann unter Umständen durch Erzeugung magnetischer Inseln in der Randschicht, die den Wärmestrom um sie herumleiten, geschützt werden. Erste Versuche mit Limiterkonstruktionen, die einerseits eine möglichst gleichförmige Verteilung der Wärmebelastung auf der Oberfläche und andererseits einen möglichst großen Teilchenabzug aus der Randschicht gewährleisten, wurden bereits an den Tokamaks Alcator, PDX, Makrotor und ISX durchgeführt, und sie werden derzeit an TEXTOR (ALT-I und später ALT-II) einer systematischen Untersuchung unterzogen.

Andere Abwandlungen und Kombinationen der hier aufgezählten Grundkonzepte sind z.B. in /0.4/ und in einzelnen Beiträgen in /0.3/ diskutiert.

2.0 PLASMATRANSPORT

Der Plasmazustand in der Randschicht (wie überall in der Entladung) ist durch Teilchen- und Energiebilanzen bestimmt. Im stationären Zustand gilt:

$$\operatorname{div}\Gamma_j - S_j = 0$$

$$\operatorname{div}Q_j - R_j = 0$$

Γ bzw. Q sind dabei Teilchen- bzw. Energieflüsse, S und R sind Teilchen- und Energiequellen, j ist ein Index für die Spezies (Elektronen, Ionen).

Drückt man die Terme mit Hilfe der Dichten n_j und der Temperatur T_j aus, so enthalten die Beziehungen für die Flüsse hauptsächlich die Transporteigenschaften, während in diejenigen für die Quellterme die atomaren Prozesse eingehen, die in der Randschicht ablaufen. Letztere sind Gegenstand der vorliegenden Arbeit; der Plasmatransport wird abgekoppelt, indem die Verteilungen der Quellterme für feste Plasmamparameter, aber ansonsten allgemeine geometrische Bedingungen berechnet werden.

2.1 DIE TRANSPORTGLEICHUNGEN

Geschlossene Systeme von Plasmatransportgleichungen sind z.B. in /0.1/, /2.6/ und /2.13/ angegeben. Sie sind nicht lokal, sondern entstehen aus den Momentengleichungen der kinetischen Gleichung durch Mittelung über die Flußflächen. Die Form der Flußflächen ist durch das MHD-Gleichgewicht bestimmt, und die zugehörigen Gleichungen sind über Plasmadruck und die Flußflächenmetrik mit den Transportgleichungen gekoppelt. Wir fassen hier nur den entkoppelten Teil eines "Standard-Tokamaks" (/0.1/) zusammen (niedriges Beta und hohes Aspektverhältnis), dessen kreisförmige Flußflächen in Toruskoordinaten dann explizit durch $r=\text{const.}$ gegeben sind (r : kleiner Torusradius). Bei selbstkonsistenter Berechnung müssen, soweit es die Verkopplung mit dem Neutralgastransport anbetrifft, die von r abhängenden Quellterme lediglich durch entsprechende Flußflächenmittel ersetzt werden. Bei dem in Kapitel 3 beschriebenen Monte-Carlo-Verfahren ergibt

sich dies automatisch, weil das betrachtete Volumen mit einem Netz von Flächen diskretisiert wird, mit welchem die Flußflächengeometrie approximiert wird.

Die Transportgleichungen lauten in dieser Näherung:

$$\partial n_j / \partial t = -1/r \cdot \partial / \partial r (r \cdot \Gamma_j) + S_j \quad j \neq e$$

$$3/2 \partial / \partial t (n_e \cdot T_e) = -1/r \cdot \partial / \partial r (r \cdot Q_e) + R_e$$

$$3/2 \partial / \partial t (n_{\text{sum}} \cdot T_i) = -1/r \cdot \partial / \partial r (r \cdot Q_i) + R_i$$

$$n_e = \sum_j Z_j n_j, \quad n_{\text{sum}} = \sum_j n_j$$

$$\partial B_\theta / \partial t = c^2 / 4\pi \cdot \partial / \partial r (1/\eta r \cdot \partial / \partial r (r \cdot B_\theta))$$

Z_j ist dabei die Ladungszahl des Ions mit Speziesindex j , B_θ ist das poloidale Magnetfeld und η die elektrische Leitfähigkeit parallel zum magnetischen Feld.

Für die Teilchen- und Energieflüsse gilt:

$$\Gamma_j = -L_{1,1,j} \cdot \partial n_j / \partial r - L_{1,2,j} \cdot \partial T_e / \partial r - L_{1,3,j} \cdot \partial T_i / \partial r$$

$$Q_e = 3/2 \cdot \Gamma_e \cdot T_e - \sum_j L_{2,1,j} \partial n_j / \partial r - L_{2,2} \partial T_e / \partial r - L_{2,3} \partial T_i / \partial r$$

$$Q_i = 3/2 \cdot \Gamma_{\text{sum}} \cdot T_i - \sum_j L_{3,1,j} \partial n_j / \partial r - L_{3,2} \partial T_e / \partial r - L_{3,3} \partial T_i / \partial r$$

$$\Gamma_{\text{sum}} = \sum_j \Gamma_j$$

Die Diffusions- und Wärmeleitungskoeffizienten $L_{k,l}$ hängen im allgemeinen vom Ort und von den lokalen Plasmagrößen ab und können im Rahmen der neoklassischen Theorie aus der Fokker-Planck-Gleichung berechnet werden (Bez.: neoklassisches Modell) /2.6/, /2.7/. Allerdings können damit die experimentellen Ergebnisse nicht adäquat wiedergegeben werden; insbesondere für die Elektronendiffusion bzw. -wärmeleitung liefert das Experiment einen um eine bzw. zwei bis drei Größenordnungen höheren Wert. Deshalb verwendet man Transportmodelle, in denen nur ein Teil der

Koeffizienten $L_{k,l}$ verwendet (im allgemeinen die diagonalen $L_{k,k}$) bzw. empirisch angepaßt wird.

Während die Ionenwärmeleitung senkrecht zum Magnetfeld meist neoklassisch angesetzt wird, werden bei neueren Simulationen für TEXTOR- oder JET-ähnliche Tokamakentladungen (/2.14/,/2.15/) die empirischen Werte ("Alcator-Skalierung")

$$\chi_{e\perp} = 5 \cdot 10^{17} / n_e \text{ (cm}^2\text{/sec)} \quad n_e \text{ in (cm}^{-3}\text{)}$$

$$D_{\perp} = 0.25 \chi_{e\perp}$$

für den Temperaturleitwert für Elektronenwärmeleitung senkrecht zum Magnetfeld $\chi_{e\perp}$ bzw. für den Diffusionskoeffizienten D_{\perp} verwendet. Der neoklassische Wert $\chi_{i\perp}$ für Ionen liegt im äußeren Teil der Entladung bei diesen Rechnungen etwa um eine Größenordnung niedriger (und nicht höher, wie beim rein neoklassischen Modell) als $\chi_{e\perp}$ und nähert sich diesem in der Plasmamitte. Die charakteristischen Zeiten für den Teilchentransport senkrecht und parallel zum Magnetfeld: τ_{\perp} und τ_{\parallel} lassen sich grob abschätzen:

$$\tau_{\perp} = a^2/D = 250 \text{ msec}$$

$$\tau_{\parallel} = 2\pi R / (2kT/m)^{1/2} = 0.1 \text{ msec}$$

(a: kleiner Radius, hier: $a=50 \text{ cm}$, $D=10^4 \text{ cm}^2\text{/sec}$, R: großer Radius, hier: 175 cm , $v=(2kT/m)^{1/2}$ thermische Geschwindigkeit eines Ions der Masse m bei einer Temperatur kT, hier: $m=1 \text{ (AME)}$, $kT=50 \text{ eV}$, $v=10^7 \text{ cm/sec}$)

Insbesondere für den Zentralkern eines heißen Tokamakplasmas ist deshalb die 1-D-Beschreibung gerechtfertigt, mit den Plasmaparametern können in dieser Näherung auch die Transportkoeffizienten als konstant auf den Flußflächen angesetzt werden.

Während die Transportgleichungen, Randbedingungen und numerischen Methoden in den meisten Transportcodes ähnlich sind (siehe z.B. /2.7/), gibt es große Unterschiede in der Behandlung anderer physikalischer Prozesse (Zusatzheizung, Neutralgas, Verunreinigungen, etc.), siehe /2.16/, /2.17/, /2.18/ für den in Jülich betriebenen Transportcode SIMTOK.

2.2 RANDSCHICHTMODELLE

Die Plasmarandschicht haben wir in der Einleitung als den von Neutralgaswechselwirkung mit dem Plasma bestimmten Teil der Entladung definiert. Die zwei- und dreidimensionalen Monte-Carlo-Rechnungen (siehe Kapitel 4) zeigen insbesondere je nach Limiter- oder Divertorkonzept poloidale oder toroidale Abhängigkeiten der Dicke dieser Schicht.

In den 1-D-Transportcodes muß diese Randschicht dagegen entweder durch zusätzliche radiale Volumenquellen oder zusätzliche radiale Flüsse, das heißt zusätzliche Transportkoeffizienten für den Transport senkrecht zum Magnetfeld, ins Modell aufgenommen werden. Letzteres ist z.B. in /2.14/ zur Simulation der durch Magnetfeldergodisierung hervorgerufenen Effekte beschrieben. Durch Limiter- bzw. Divertorwirkung verursachte Quellen sind z.B. in /1.3/, /1.4/ in für Transportcodes geeigneter Form angegeben.

Diese 1-D numerischen Randschichtmodelle simulieren das Strömen parallel zu den Feldlinien, begrenzt durch eine elektrostatische Schicht vor den Limiterflächen bzw. Prallplatten, in /1.4/ noch unter Berücksichtigung von Effekten eventueller magnetischer Spiegel (z.B. beim Bündeldivertor). Allerdings liegen die Zeitskalen für das parallele Strömen und die senkrechte Diffusion hier dicht beieinander, was eigentlich eine typische 2-D-Situation ist, siehe Kapitel 2.3.

Der nach dem in Kapitel 3 beschriebenen Algorithmus entwickelte Neutralgascodemodell hat variable Dimensionalität, ist also beiden Fällen angepaßt. Folgende Quellterme werden damit u. a. berechnet:

$$1. \quad S_{ion,e,A} = n_e \cdot n_A \cdot s_{ei} + n_i \cdot n_A \cdot s_{ii} \quad (2.1.1)$$

Damit ist die Quelle für Elektronen durch Ionisation neutraler Atome ($\text{cm}^{-3} \text{sec}^{-1}$) gegeben. n_e , n_i bzw. n_A sind die Teilchendichten der Elektronen, Ionen bzw. der Neutralgasatome. s_{ei} und s_{ii} sind die Ratenkoeffizienten für Elektronenstoß- bzw. Ionenstoßionisation. s_{ei} ist wegen der großen Geschwindigkeitsunterschiede der Stoßpartner praktisch unabhängig von der Geschwindigkeitsverteilung der

Gleichzeitig könnte der für Helium-Abzug als ausreichend angesehene Gasdurchsatz von $\approx 4 \cdot 10^{21}$ Teilchen/sec auf Grund des sich in diesem "Hoch-Recycling-Bereich" ($R = 20$) ausbildenden Neutralgasdruckes (10^{-3} Torr, gegenüber $10^{-6} - 10^{-5}$ Torr bei niedrigem Recycling ($R = 1$)) ohne extreme Forderungen an das Pumpsystem (loc.cit. und /0.8/) erreicht werden. Der Parameter R ist das Verhältnis von Teilchenfluß an der Prallplatte zu Teilchenfluß in den Divertor bzw. in die Limiter-Abschältschicht. Die durch diesen Parameter gekennzeichneten Divertor/Limiter-Regime lassen sich experimentell durch Divertorgeometrie und Pumpsysteme einstellen.

In /2.22/ werden in diesem Zusammenhang auch experimentelle Ergebnisse diskutiert, danach liegt in ASDEX- und DIII-Entladungen der "Hoch-Recycling-Bereich" bereits vor, einige der DIII- und einige Limiterentladungen liegen sogar noch wesentlich darüber:

$R > 100$, $T_e < 10$ eV, $n_e > 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, Neutralgasdruck $> 10^{-3}$ Torr.

Der Neutralgasttransport wird in unserem Monte-Carlo-Modell in jedem Fall dreidimensional behandelt. Die oben erwähnte variable Dimensionalität betrifft nicht das maschinelle Erzeugen der Trajektorien der Testteilchen für das Monte-Carlo-Zufallsexperiment, sondern nur das statistische Auswerten dieser Stichproben, welches um so effektiver (das heißt: kleinere statistische Schwankungen bei gleicher Rechenzeit) möglich ist, je grober die benötigte Ortsauflösung der Profile (hier der Quellterme) ist. Deshalb ergibt sich für die Ankopplung des Neutralgascodes an diese neuen 2-D-Zweiflüssigkeitsmodelle für die Abschälzone nichts prinzipiell anderes als bei der Verknüpfung mit den 1-D-Plasmatransportmodellen.

Die im Monte-Carlo-Algorithmus erzielten Rechengenauigkeiten sind aber auch von R bestimmt, nämlich über das Verhältnis von freier Weglänge für Neutralteilchen zu den Gefäßdimensionen λ/l . ($\lambda \gg l$ für $R \approx 1$, $\lambda \ll l$ für $R > 100$)

Die in /0.6/ und /0.7/ eingesetzten Verfahren sind für $R \approx 1$ effektiv, die in /0.8/ und /3.40/ sind für große R günstiger. Das im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelte Rechenprogramm kombiniert und erweitert diese Algorithmen, je nach vorliegendem Regime mit unterschiedlicher Gewichtung.

3.0 NEUTRALGASTRANSPORT

Das Vorgehen in offenbar allen bislang im Rahmen der Tokamaksimulation eingesetzten Neutralgas-Monte-Carlo-Codes ist ähnlich: Man macht sich zunächst ein Bild über den stochastischen Prozeß, der ein Modell für das Verhalten des Gases bilden soll. Das heißt, man legt die Quellen und die zu berücksichtigenden Wechselwirkungsprozesse (mit dem Plasma und den Wänden des Gefäßes) fest. Mit Hilfe von Zufallszahlen wird dann dieser Prozeß im Rechner möglichst genau nachgebildet, und die so erhaltenen Trajektorien (Stichproben) werden hinterher ausgewertet. Dies alles ist möglich ohne Bezugnahme auf eine Transportgleichung. In /3.6/ ist solch ein Vorgehen (im Hinblick auf Anwendungen in der Neutronentransporttheorie) beschrieben, außerdem sind Algorithmen zur praktischen Modellierung verschiedener Standardsituationen (cosinusverteilte Quelle, isotrope Verteilung nach einem Stoß, etc.) angegeben.

Je genauer ein Monte-Carlo-Code einem speziellen Modell angepaßt ist, desto weniger flexibel wird er im allgemeinen sein. Wegen der sehr unterschiedlichen geometrischen und physikalischen Verhältnisse, auf die wir den hier beschriebenen Code anwenden wollen und auch aus statistischen Gründen, müssen andere Modelle simuliert werden, als sie dem realen System entsprechen. Ionisations- und Wandprozesse können zum Beispiel zu einer so starken Reduzierung des Neutralteilchenflusses führen, daß bei ökonomisch vertretbaren Rechenzeiten Testteilchen nicht mehr in ausreichender Zahl ins Plasmazentrum gelangen, um zum Beispiel statistisch präzise Aussagen über den hochenergetischen Teil des Umladungsspektrums zu treffen.

"Verfälscht" man vorsätzlich unter Einführung statistischer Gewichte das Transportverhalten der Testteilchen, dann kann man sich bei Beschränkung auf Intuition, ohne Bezugnahme auf die Transportgleichung und ohne Berechnung des Erwartungswertes des statistischen Algorithmus nicht mehr unbedingt auf die Korrektheit des Ergebnisses verlassen.

Deshalb entwickeln wir in diesem Kapitel die theoretischen Grundlagen, auf denen der beschriebene Monte-Carlo-Code beruht. Wir verwenden dann bei den Beispielen in Kapitel 4 nur solche Schätzfunktionen, für die der Erwartungswert hier berechnet worden ist.

3.1 WAHRSCHEINLICHKEITSTHEORETISCHE GRUNDLAGEN

In den folgenden Abschnitten 3.1 und 3.2 werden zunächst die wahrscheinlichkeitstheoretischen Grundlagen, soweit sie für die Begründung des speziellen hier verwendeten Monte-Carlo-Codes erforderlich sind, zusammengestellt. Die Eingangsabschnitte folgen der in den Standard-Lehrbüchern üblichen Darstellung, (/3.1/ bis /3.4/), die Herleitungen in späteren Kapiteln beruhen auf Originalliteratur bzw. stellen eigene Weiterentwicklungen dar. Um den Bezug zu den späteren Anwendungen herzustellen, wird mehrfach auf die physikalische Situation hingewiesen.

3.1.1 WAHRSCHEINLICHKEITSRAUM, WAHRSCHEINLICHKEITSMAB, ZUFALLSVARIABLE

Das als Modell geeignete mathematische Objekt für die Beschreibung eines vom Zufall abhängenden Experimentes, der **Wahrscheinlichkeitsraum** W , ist ein Tripel: (Ω, \mathcal{V}, p) . Ω bedeutet dabei eine Menge von Ereignissen ω , \mathcal{V} ist eine σ -Algebra, d.h. ein System von Teilmengen A von Ω , das die folgende Eigenschaft hat:

$$i) \quad \emptyset \in \mathcal{V}, \quad \Omega \in \mathcal{V} \quad (\emptyset \text{ ist die leere Menge}) \quad (3.1.1)$$

$$ii) \quad \text{wenn } A \in \mathcal{V}, \text{ dann auch } \Omega - A \in \mathcal{V} \quad (3.1.2)$$

$$iii) \quad \text{wenn } A_i \in \mathcal{V}, \quad i=1,2,3,\dots, \text{ dann auch } \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{V} \quad (3.1.3)$$

Die Mengenfunktion $p : \mathcal{V} \rightarrow [0,1]$ heißt **Wahrscheinlichkeit** (kurz: W -Maß), wenn sie die folgenden Kolmogoroff'schen-Axiome erfüllt:

$$i) \quad p(A) \geq 0 \quad \text{für alle } A \in \mathcal{V} \quad (3.1.4)$$

$$ii) \quad p\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} p(A_i) \quad \text{für disjunkte } A_i \in \mathcal{V} \quad (3.1.5)$$

$$iii) \quad p(\Omega) = 1 \quad (3.1.6)$$

Die wichtigste später betrachtete Konkretisierung für Ω ist die Menge aller Zufallsspazierwege von neutralen Teilchen in einem Volumen. Diese sind im allgemeinen verzweigt, z.B. durch Dissoziationsprozesse. Das W-Maß, das dann die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der bestimmte "random walks" vorkommen, ist dann festgelegt durch die Verteilung der Quellen für neutrale Teilchen, durch die in Betracht gezogenen Stoßprozesse mit anderen Teilchen (Plasma) oder mit den Wänden und durch die Mechanismen, die zum Abbruch der Lebenslinie eines Teilchens, im folgenden kurz als Historie bezeichnet, führen (z.B. das Entweichen durch Gefäßöffnungen, aber auch Ionisation).

Um aus $W = (\Omega, \mathcal{V}, p)$ ein abstraktes mathematisches Objekt zu erhalten, das von der speziellen experimentellen Situation unabhängig ist, definiert man "Zufallsvariable" (kurz: ZV) $X : \Omega \rightarrow \Omega'$, d.h. Funktionen von Ω in einen anderen (mathematischen) Raum Ω' , auf dem auch eine σ -Algebra \mathcal{V}' definiert ist (Bezeichnung für (Ω', \mathcal{V}') : "Meßraum").

Von X wird die " \mathcal{V} - \mathcal{V}' -Meßbarkeit" verlangt, d.h.

$$X^{-1}(A') \in \mathcal{V} \quad \text{für alle } A' \in \mathcal{V}' \quad (3.1.7)$$

Gilt nämlich (3.1.7), dann wird durch $p_X(A') := p(X^{-1}(A'))$ auf (Ω', \mathcal{V}') auch ein W-Maß $p' = p_X$ definiert. Ω' ist in dieser Arbeit eine Menge von reellen Zahlen oder von n -Tupeln reeller Zahlen; \mathcal{V}' ist die "Borel'sche- σ -Algebra", also die kleinste σ -Algebra, die alle offenen Mengen von Ω' enthält. Um hervorzuheben, wenn es sich um diesen elementaren Meßraum handelt, schreiben wir (E, \mathcal{B}) bzw. (E^n, \mathcal{B}^n) , wenn die Dimension n von E eine Rolle spielt.

Unter dem k-ten Moment einer Zufallsvariable X versteht man die Größe:

$$M_k = \int_{\Omega} X^k dp \quad (3.1.8a)$$

Das Integral ist zunächst im allgemeinen maßtheoretischen Sinn zu verstehen. Konkreter wird dieser Begriff, wenn man durch $F_X = p\{\omega \in \Omega \mid X(\omega) \leq x\}$ die zu X gehörende "Verteilungsfunktion" (kurz: VF) definiert ($x \in E^1$). Im n-dimensionalen Fall läßt sich eine VF auch noch, nämlich komponentenweise durch n Ungleichungen definieren. Es gilt dann

$$M_k = \int_E x^k dF_X \quad (3.1.8b)$$

Nun handelt es sich um ein "Lebesgue-Stieltjes-Integral". Ist F_X sogar "absolut stetig", besitzt also eine "Verteilungsdichte" (kurz: VD) $f_X(x)$, dann gilt weiter:

$$M_k = \int_E x^k \cdot f_X(x) dx \quad (3.1.8c)$$

M_k kann dann also als Lebesgue-Integral berechnet werden. Von besonderem Interesse sind die ersten beiden Momente: der Erwartungswert $M_1 := E(X)$ und M_2 bzw. das "zentrierte" zweite Moment $M_2' = M_2(X - M_1) := \sigma_X^2$ (Bez.: (stochastische) "Varianz"), wodurch ein Maß für statistische Schwankungen um M_1 gegeben ist. Später werden "Schätzfunktionen" definiert, nämlich Zufallsvariable auf der oben erwähnten Menge aller Irrpfade, die jeder Historie eine Zahl zuordnen derart, daß M_1 genau die zu berechnende (genauer: zu schätzende) Größe ist und M_2' möglichst klein wird.

Die hier zusammengestellten Begriffe können leicht auf mehrere ZV und deren gemeinsame VFn bzw. VFn verallgemeinert werden. Für spätere Zwecke soll der folgende wichtige Satz (z.B. /3.4/ p52) vorangestellt werden, der von einer Beziehung zwischen den Zufallsvariablen auf eine Beziehung zwischen deren Verteilungsdichten führt.

Satz 3.1 Sind X_1, X_2, \dots, X_n bzw. Y_1, Y_2, \dots, Y_n ZV mit der gemeinsamen Dichte $f_X(x_1, \dots, x_n)$ bzw. $f_Y(y_1, \dots, y_n)$, ist ferner $X_i = h_i(Y_1, \dots, Y_n)$ $i=1, \dots, n$ eine Transformation mit von Null verschiedener Funktionaldeterminante Φ , dann gilt:

$$f_Y(y_1, \dots, y_n) = f_X(h_1(y_1, \dots, y_n), \dots, h_n(y_1, \dots, y_n)) \cdot |\Phi| \quad (3.1.9)$$

3.1.2 BEDINGTE ERWARTUNGSWERTE

Die ZV X enthält Informationen über das durch $W = (\Omega, \mathcal{V}, p)$ beschriebene Experiment in dem Sinne, daß die Kenntnis eines Zahlenwertes $X(\omega_0)$ aus E etwas über den Ausgang des Experiments aussagt. Ein Maß dafür, wieviel an Information durch X tatsächlich in den Raum (E, \mathcal{B}, p_X) übertragen wird, ist die Größe der σ -Algebra \mathcal{V} , hinsichtlich der die Meßbarkeitseigenschaft (3.1.7) noch gilt. Die größte (d.h. kleinste) derartige σ -Algebra sei $\mathcal{V}_X (\subseteq \mathcal{V})$. Will man zu noch größeren σ -Algebren $\mathcal{V}_X = \mathcal{V}_1 \supset \mathcal{V}_2 \dots \supset \mathcal{V}_n = \{\emptyset, \Omega\}$ übergehen, so ist dies nur mit Glättung von X , also einem Informationsverlust, möglich. Diese neuen ZV heißen "bedingte Erwartungswerte von X unter der Bedingung \mathcal{V}_1 " ($i=1, 2, \dots, n$), Bez.: $E(X|\mathcal{V}_1)$. Im Extremfall $i = n$ ist $E(X|\mathcal{V}_n)$ konstant und zwar gleich dem Erwartungswert $E(X)$. Man kann solche Glättungen auch ineinander schachteln, dann gilt fast sicher (/3.1/, Satz 54.18):

$$E(X|\mathcal{V}_\kappa) = E[E(X|\mathcal{V}_1)|\mathcal{V}_\kappa] \text{ für } 1 \leq i \leq \kappa \leq n \quad (3.1.10)$$

insbesondere also:

$$E(X) = E(X|\mathcal{V}_n) = E[E(X|\mathcal{V}_1)|\mathcal{V}_n] \text{ für } 1 \leq i \leq n \quad (3.1.11)$$

(Das Wort "fast" in Zusammenhängen wie "fast immer", "fast nirgends", u.s.w. bedeutet immer, daß eine Aussage für alle $\omega \in \Omega - N$, mit $N \subseteq A$, $A \in \mathcal{V}$ und $p(A) = 0$ gilt.)

Ist im schon erwähnten Beispiel Y diejenige ZV, die jedem Irrpfad $\omega \in \Omega$ die Anzahl k der Stoßprozesse von Beginn bis Ende des Weges zugeordnet, \mathcal{V}_Y also die größte zugehörige σ -Algebra, ferner X eine Schätzfunktion (z.B. für Teilchendichte, Fluß u.s.w.) mit $\mathcal{V}_X \supseteq \mathcal{V}_Y$, dann stellt $X(\omega)$ den aktuellen Beitrag der Historie ω zur Schätzung dar. Der Wert $E(X|\mathcal{V}_Y)(\omega)$ der geglätteten ZV ist dagegen eine Mittelung über die Beiträge aller Zufallswege mit gleicher Anzahl von Stoßprozessen wie ω .

Man kann auf diese Weise aus einer Schätzfunktion X weitere (nämlich glattere) finden mit gleichem 1. Moment aber u.U. kleinerem zentrierten 2. Moment (Formel 3.1.10). Außerdem kann man bei der Berechnung von $E(X)$ schrittweise (sukzessives Glätten, wegen (3.1.11)) vorgehen.

3.1.3 STOCHASTISCHE PROZESSE

Die Beschreibung des Neutralgastransportes in einem endlichen Volumen mit festen Begrenzungen (mit Wänden, etc.) erfordert die gleichzeitige Betrachtung einer ganzen "Familie von Zufallsvariablen" $(X_t, t \in I)$ auf (Ω, \mathcal{V}, p) mit dem gemeinsamen Meßraum (auch "Zustandsraum") (E, \mathcal{B}) .

I ist dabei eine Indexmenge ("Zeitmenge"), hier ein Intervall auf der positiven reellen Halbachse. $X_t(\omega)$ ist dann der physikalische Zustand eines Teilchens zum Zeitpunkt t , das zur Zeit $t_0 = 0$ im Zustand $X_{t_0}(\omega)$ gestartet ist.

Unter einem "stochastischen Prozeß" versteht man nun ein Quadrupel $(\Omega, \mathcal{V}, p, (X_t, t \in I))$. Für ein festes $\omega \in \Omega$ heißt die auf I definierte E -wertige Funktion $X_t(\omega)$ von t "Realisierung" oder suggestiver "Pfad" oder "Trajektorie" des Prozesses.

Sei $H(I)$ die Menge aller endlichen Teilmengen von I . Durch:

$$F_J := F_{X_{t_1}, \dots, X_{t_n}}(x_1, \dots, x_n) := p\{X_{t_1} \leq x_1, \dots, X_{t_n} \leq x_n\} \text{ für } J = \{t_1, t_2, \dots, t_n\} \quad (3.1.12)$$

wird für jedes $J \in H(I)$ auf dem Produktraum (E^J, \mathcal{B}^J) eine endlichdimensionale VF definiert (falls X_t vektorwertige ZV ist, sind die Ungleichungen komponentenweise zu verstehen). Ist $J_1 \in H(I)$ mit $J_1 \subset J$, dann erhält man offenbar F_{J_1} aus F_J , indem man in F_J alle diejenigen Argumente gleich unendlich setzt (Bilden der Randverteilung), deren Index in J , nicht aber in J_1 liegt. Ebenfalls aus (3.1.12) läßt sich unmittelbar ablesen, daß, wenn J_1 aus J nur durch Umordnen hervorgeht, man in diesem Fall F_{J_1} aus F_J durch entsprechendes Umordnen der Argumente erhält. Diese Eigenschaften heißen "Verträglichkeitsbeziehungen" der Familie $(F_J, J \in H(I))$, eine Familie mit dieser Eigenschaft heißt "projektiv" und jeder stochastische Prozeß liefert also eine projektive Familie endlichdimensionaler VFn. In den nachfolgenden Kapiteln wird es darum gehen, aus der Boltzmann-Gleichung für die neutrale Komponente einen geeigneten stochastischen Prozeß zu konstruieren, dessen Pfade die Ereignismenge für das Monte-Carlo-Zufallsexperiment bilden.

Ein erster Schritt hierzu ist nun die Umkehrung des eben geschilderten Sachverhaltes, daß nämlich eine projektive Familie $(F_J, J \in H(I))$ von endlichdimensionalen VFn einen stochastischen Prozeß $(\Omega', \mathcal{V}', p', (X_t', t \in I))$ liefert, dessen zugehörige Familie endlichdimensionaler VFn gerade wieder $(F_J, J \in H(I))$ ist. Z.B. kann man setzen: $\Omega' = E^I$ und $\mathcal{V}' = \mathcal{B}^I$, die Borel'sche Produkt- σ -Algebra, deren spezielle Form in dieser Arbeit allerdings unwesentlich ist (ebenso wie die ZVn X_t'). Von Bedeutung ist lediglich das W-Maß p' , denn hinsichtlich dieses Maßes müssen die Schätzfunktionen (gemäß (3.1.8) und anschließender Bemerkung) integriert werden.

Das o.a. für die Theorie stochastischer Prozesse zentrale Resultat stammt von Kolmogoroff (/3.1/, Satz 62.3) und setzt topologische Eigenschaften des Zustandsraumes (E, \mathcal{B}) voraus. In unserem Fall ist der Zustand eines neutralen Teilchens zunächst durch seine Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten r und v im Phasenraum (also im R^6) gegeben. Wird die Zeit als weitere Zustandkomponente behandelt (wie es bei zeitlich inhomogenen Problemen, also nicht konstanten Plasmabedingungen, nötig wäre), so erhöht sich die Dimension von E noch einmal. Zu diesen kontinuierlichen Variablen tritt in unserem Fall noch eine weitere, nur diskreter Werte $1, 2, \dots, m, m+1$ fähige Variable j hinzu. Dabei soll j ein Index für die Spezies des Neutralteilchens sein, falls $j \leq m$. $j = m+1$ soll dagegen bedeuten, daß die Historie abgebrochen ist. Wird z.B. nur eine Sorte von neutralen Teilchen behandelt, dann hat die Variable j solange den Wert 1, bis (beispielsweise durch Ionisation) der Zustand "absorbiertes Teilchen" $j=2$ eintritt. Sei $M := \{1, 2, \dots, m+1\}$, dann ist also

$$E = M \times R^6 \text{ bzw. } E = M \times R^6 \times R^+ \tag{3.1.13a}$$

Oft wird die Abkürzung benutzt:

$$x = (j, r, v) \text{ bzw. } x = (j, r, v, t) \text{ , also } x \in E. \tag{3.1.13b}$$

Im Anhang A.0 wird kurz begründet, warum mit diesem Zustandsraum die Voraussetzungen für den Satz von Kolmogoroff erfüllt sind.

In unserem Anwendungsfall werden nicht nur die VFn $F_J, J \in H(I)$ sondern sogar deren Dichten f_J konstruiert. Physikalisch ist

$$p = \int_{B_1} dx_1 \int_{B_2} dx_2 \dots \int_{B_k} dx_k f_J(x_1, x_2, \dots, x_k) ; B_i \in B, i=1, 2, \dots, k \quad (3.1.14)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilchen nacheinander Zustände $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_k$ durchläuft mit $\omega_1 \in B_1, \omega_2 \in B_2, \dots, \omega_k \in B_k$.

Dabei wurden zur Verkürzung der Schreibweise die Summationen über die Speziesindices auch formal als Integral geschrieben. Diese Konvention wird auch im weiteren beibehalten.

Es sei hier schon erwähnt, daß sich die Verträglichkeitsbeziehung unmittelbar aus dem Aufbau der VDN ergeben wird, die nämlich sukzessive aus sogenannten "bedingten Dichten" zusammengesetzt werden. Dabei ist:

$$f(x_{i+1}, \dots, x_k | x_1, \dots, x_i) = \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_k)}{\int_E dx_{i+1} \dots \int_E dx_k f(x_1, x_2, \dots, x_k)} \quad (3.1.15)$$

die bedingte Dichte von (x_{i+1}, \dots, x_k) bei gegebenem (x_1, \dots, x_i) . In unserem Anwendungsfall werden wir zunächst eine Funktion $f_1(x_1)$ definieren ("Startverteilungsdichte", gegeben durch die Quellen für Neutralgas), ferner bedingte Übergangswahrscheinlichkeiten:

$$f_{2/1}(x_2 | x_1) ; f_{3/2}(x_3 | x_1, x_2) ; f_{4/3}(x_4 | x_1, x_2, x_3) \text{ u.s.w.}$$

so daß man setzen kann:

$$f_2(x_1, x_2) = f_1(x_1) \cdot f_{2/1}(x_2 | x_1)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3) = f_1(x_1) \cdot f_{2/1}(x_2 | x_1) \cdot f_{3/2}(x_3 | x_1, x_2)$$

•
•
•

(3.1.16)

Das auf stochastische Systeme übertragene Kausalitätsprinzip (der "Markov-Charakter" des Prozesses) drückt sich darin aus, daß die bedingten Dichten in Wirklichkeit nicht von allen angeschriebenen, sondern nur von der jeweils letzten Bedingung anhängen, so daß also nur eine bedingte Dichte $f_{2/1}(x_2 | x_1)$ angegeben werden muß. In dieser Tatsache liegt

auch der mit entscheidenden Vorteilen verbundene Umstand begründet, daß der rechnerische Aufwand bei Anwendung eines Monte-Carlo-Verfahrens auf einen ganz kleinen Teil des Zustandsraumes (in der Nähe des gerade betrachteten Testteilchens) konzentriert werden kann.

3.1.4 STATISTISCHE AUSWERTUNG

Das Monte-Carlo-Verfahren beruht auf dem (maschinellen) Ziehen von Stichproben ω_i , $i=1,2,\dots,n$, aus einer Grundgesamtheit Ω (hier: die Menge der "random walks") und dem nachfolgenden Berechnen des Wertes einer ZV $X(\omega_i)$. M_1 sei wieder der Erwartungswert von X (hier: hinsichtlich des durch den stochastischen Prozeß definierten Maßes p auf Ω) und σ_X^2 sei wieder die Varianz. X wird so bestimmt (in Kapitel 3.3 und 3.4), daß $M_1 = I$ gilt, wobei I die jeweils gesuchte Größe ist. Dagegen ist σ_X^2 (außer in einfachen Fällen) i. a. nicht bekannt, weil die Integration von X^2 hinsichtlich p zu aufwendig wäre.

Das endgültige Ergebnis ist der Wert der ZV X_n

$$X_n(\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n) = 1/n \cdot \sum_i X(\omega_i) \quad (3.1.17)$$

Die Konvergenz des Verfahrens ist in jedem Fall durch das "starke Gesetz der großen Zahlen" gesichert, demzufolge gilt:

$$p\{\omega \in \Omega^\infty \mid \lim_{n \rightarrow \infty} 1/n \sum_i (X(\omega_i) - I) = 0\} = 1, \quad \omega = (\omega_1, \dots, \omega_n, \omega_{n+1}, \dots) \quad (3.1.18)$$

Allerdings ist es schwer, etwas genaues über die Güte der Näherung bei endlichem n zu sagen.

Für die Varianz von X_n gilt:

$$\sigma_{X_n}^2 = 1/n \cdot \sigma_X^2 \quad (3.1.19)$$

und die ZV $\text{Var}(\omega_1, \dots, \omega_n)$ mit

$$\text{Var} = 1/(n-1) \cdot \left\{ \sum_i X_i^2 - 1/n (\sum_i X_i)^2 \right\} \quad (3.1.20)$$

ist eine "erwartungstreue" Schätzfunktion für σ_X^2 , d.h. $E(\text{Var}) = \sigma_X^2$. In dieser Arbeit wird immer der Wert des "Variabilitätskoeffizienten":

$$s = \text{Stv}_{X_n} / X_n \text{ mit } \text{Stv}_{X_n} = (\text{Var}/n)^{1/2}, \text{ bzw. } s^* = 100 \cdot s (\%) \quad (3.1.21)$$

angegeben. Ist nämlich σ_X^2 endlich (in dieser Arbeit immer der Fall!), dann ist die ZV X_n approximativ normalverteilt, um den Mittelwert I und mit der Varianz $\sigma_{X_n}^2$ ("Zentraler Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitstheorie"). Wäre die Verteilung von X selbst bekannt, dann ließen sich zu vorgebbaren Fehlerwahrscheinlichkeiten Konfidenzintervalle für die Schätzung $X_n(\omega_1, \dots, \omega_n)$ angeben (bei normalverteiltem X z.B. mit Hilfe der "Student'schen t-Verteilung"). In unserem Fall können wir aber nur den Wert der ZV Stv_{X_n} als Näherung für $\sigma_{X_n} = (\sigma_X^2)^{1/2}$ verwenden und davon ausgehen, daß bei den in dieser Arbeit verwendeten Werten von n (500 - 3000) die ZV X_n schon sehr gut normalverteilt ist. In diesem Fall ist die Güte der Näherung mit der Angabe des Variabilitätskoeffizienten s näherungsweise festgelegt.

Tabelle 3.1.1 (entnommen: /3.47/)

γ	0.70	0.80	0.85	0.90	0.95	0.99	0.999
c	1.036	1.282	1.440	1.645	1.960	2.576	3.291

Unter diesen Annahmen: normalverteilung von X_n und:

$$\text{Stv}_{X_n}(\omega_1, \dots, \omega_n) \approx \sigma_{X_n}$$

ist ein Ergebnis der Form:

$$I = X_n \pm s^*$$

mit den Werten aus Tab. 3.1.1 wie folgt zu interpretieren:

In etwa 70 von 100 Durchführungen der Rechnung liegt der Erwartungswert I innerhalb des Intervalls $X_n \pm s^*$, in sogar cirka 95% der Fälle liegt er noch innerhalb des Intervalls $X_n \pm 2 \cdot s^*$, allgemein ist γ die Wahrscheinlichkeit, daß I innerhalb des Intervalls $X_n \pm c \cdot s^*$ liegt.

3.2 ERZEUGEN VON VERTEILUNGEN

Wie bereits im einleitenden Kapitel bemerkt, kommt es bei den anzuwendenden "Monte-Carlo"-Verfahren darauf an, Zufallsvariable durch aktuelle Zufallszahlen zu ersetzen, um auf diese Weise die "Stichproben zu ziehen". Aus diesem Grund werden in diesem Abschnitt Verfahren beschrieben, die solche Zahlen auf einer elektronischen Datenverarbeitungsanlage zu erzeugen gestatten. Es wird dann im konkreten Anwendungsfall genügen, die Verteilungsfunktion anzugeben, die bei der Modellierung einer physikalischen Situation auftritt; Wiederholungen durch explizite Erläuterung des Verfahrens für die Erzeugung der Zufallszahlen können dadurch vermieden werden.

Es wird sich zeigen, daß das Problem der Generierung von Zufallszahlen mit beliebig vorgebbarem Verteilungsgesetz sich zurückführen läßt auf das überwiegend zahlentheoretische Problem der Erzeugung einer Sequenz von Zahlen, die möglichst gut die Eigenschaften einer Folge unabhängiger und auf dem Intervall $[0,1]$ gleichverteilter Zufallszahlen besitzt (sogenannte "Pseudo-Zufallszahlen").

3.2.1 BELIEBIGE VERTEILUNGEN

In diesem Unterabschnitt nehmen wir an, daß eine Folge von beliebig vielen unabhängigen gleichverteilten Zufallszahlen zur Verfügung steht (Bez.: $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots$), zu dieser Voraussetzung werden dann in zweiten Unterabschnitt einige Bemerkungen angeführt.

Es sei nun eine VF $F(x)$ gegeben, auf einem Intervall $[a,b]$. Ein einfacher und häufig vorkommender Fall liegt vor, wenn $F(x)$ eine Dichte $f(x)$ besitzt, die eine reine Treppenfunktion ist. Die Sprungstellen seien

$$a = x_1, x_2, \dots, x_n = b$$

und die zugehörigen Werte von F an diesen Stellen:

$$F_1, F_2, \dots, F_n$$

Ferner sei i der größte Index, so daß noch $F_i < \xi$ gilt (ξ ist irgend ein Glied der Folge ξ_1, ξ_2, \dots). Dann ist nämlich

$$\delta = x_{i+1} - (F_{i+1} - \xi) / (F_{i+1} - F_i) * (x_{i+1} - x_i) \quad (3.2.1)$$

eine nach $F(x)$ verteilte Zufallszahl /3.6/.

Dieses Verfahren findet u.a. immer dann Anwendung, wenn $F(x)$ oder $f(x)$ nur tabellarisch vorliegen, wie z.B. häufig bei Modellen für Reflexion der neutralen Teilchen oder Ionen an materiellen Wänden, wenn die Reflexionswahrscheinlichkeiten oder die Energieverteilungen der reflektierten Teilchen als Funktion der Teilchenenergie und/oder des Aufprallwinkels gemessen worden sind.

Ist sogar $F(x)$ selbst eine Treppenfunktion, liegt also eine diskrete Verteilung vor, die lediglich einen der Werte x_1, x_2, \dots, x_n mit positiver Wahrscheinlichkeit liefert, dann entfällt noch die lineare Interpolation in (3.2.1), und es ist nur der Index i zu bestimmen. Dieser Fall tritt unter anderem bei der Festlegung der neuen Spezies des Testteilchens nach einem nichtdiagonalen Ladungsaustausch-Stoß (z.B. $H+D^+ \rightarrow H^++D$) oder einem Wandprozeß (z.B. $2H \rightarrow H_2$) auf. Für den allgemeinen Fall ist zunächst festzustellen, daß sich jede VF $F(x)$ eindeutig zerlegen läßt in eine Summe:

$$F(x) = F_t(x) * p_1 + F_a(x) * p_2 + F_s(s) * p_3 \quad (3.2.2)$$

mit $p_1, p_2, p_3 \geq 0$ und $p_1 + p_2 + p_3 = 1$.

Hierbei ist F_t eine reine Treppenfunktion, F_a absolut stetig (also mit einer Dichte f) und F_s eine singuläre VF, d.h. eine stetige Verteilung mit fast sicher verschwindender Ableitung. Letztgenannter Anteil kommt in Anwendungen nicht vor, wir können deshalb immer $p_3 = 0$ annehmen. Mit Hilfe der durch p_1 und p_2 definierten diskreten Verteilung läßt sich nun eine Entscheidung zwischen F_t und F_a treffen. Der Fall von F_t ist oben erle-

dig, im folgenden kann also die VF als absolut stetig vorausgesetzt werden. Dann kann der in 3.1.1 zitierte Satz 3.1 angewendet werden. Dazu sei in diesem Satz $n=1$, ferner X eine gleichverteilte ZV, d.h.

$$f_X(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \in [0,1] \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

ξ sei wieder eine Realisierung dieser Verteilung und die VF der zu erzeugenden Zufallszahl sei F_Y , mit der Dichte f_Y . Wählt man als Transformation im zitierten Satz:

$$X = h(Y) := F_Y(Y) \quad , \text{ also } \delta = f_Y (\geq 0) ,$$

dann gilt für die Verteilung der mittels

$$\delta = h^{-1}(\xi) = F_Y^{-1}(\xi) \tag{3.2.3}$$

berechneten Zahl $\delta : f_X(F_Y(y)) \cdot f_Y(y) = f_Y(y)$, δ hat also die gewünschte Verteilung. Damit läßt sich also prinzipiell jede VF (durch eine Invertierung) erzeugen. Die Unabhängigkeit einer ganzen Sequenz $\delta_1, \delta_2, \dots$ ergibt sich aus derjenigen der Folge ξ_1, ξ_2, \dots . (Zur Vollständigkeit sei noch erwähnt, daß an Stellen, an denen F_Y nur monoton, nicht jedoch streng monoton ist, zur Berechnung von δ das Supremum der Menge $F_Y^{-1}(\xi)$ zu nehmen ist.)

Beispiel 3.1 Zur Simulation von Wandprozessen werden oft Zahlen mit der durch: $f_Y(y) = (r+1) \cdot \cos^r(y) \cdot \sin(y)$, $y \in [0, \pi/2]$, $r \neq -1$

gegebenen Dichte benötigt, z.B. wenn durch Y der Winkel eines an der Wand reflektierten oder dort desorbierten Teilchens gegen die Oberflächennormale gegeben ist. Für $r=0$ liegt eine isotrope Verteilung vor, $r=1$ liefert die Cosinus-Verteilung (z.B. "diffuse Reflexion"). In beiden Fällen ist Gleichverteilung bezüglich des Azimutwinkels vorausgesetzt. Es ist

$$F_Y(y) = (r+1) \cdot \int_0^y \cos^r(y') \sin(y') dy' = 1 - \cos^{r+1}(y) \tag{3.2.4}$$

Deshalb hat nach obigem "Inversionsverfahren" die Zahl

$$\delta = \arccos(1-\xi)^{1/r+1}$$

die verlangte Verteilung. ξ und $1-\xi$ haben die gleiche Verteilung; da überdies in der Regel nicht δ selbst, sondern nur $\cos(\delta)$ gebraucht wird, hat man nur

$$\cos(\delta) = \xi^{1/r+1}, \text{ insb. } \cos(\delta) = (\xi)^{1/2} \text{ (für die cos. Verteilung)}$$

zu berechnen. (3.2.5)

Neben dem zwar immer anwendbaren aber mitunter uneffektiven Inversionsverfahren gibt es noch eine Vielzahl speziell auf einzelne VFn zugeschnittene Algorithmen. Oft erlauben einfache Sätze aus der Wahrscheinlichkeitstheorie eine günstige Darstellung $\delta = h(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ für die gesuchte Zufallszahl δ

Beispiel 3.2 Um die Koordinaten v_x, v_y, v_z eines Testteilchens im Geschwindigkeitsraum festzulegen, muß oft aus einer Maxwell-Verteilung gesammelt werden (z.B. wenn es gerade einen Ladungsaustauschstoß in einem Plasma mit Maxwell'scher Geschwindigkeitsverteilung erlitten hat). Dies läßt sich auch dann noch, wenn eine zusätzliche Driftgeschwindigkeit überlagert ist, durch lineare Transformation (Satz 3.1!) auf das Problem zurückführen, drei unabhängige normalverteilte Zufallszahlen $\delta_1, \delta_2, \delta_3$ zu generieren. Sei dazu mit den Bezeichnungen von Satz 3.1:

$$f_X(x_1, x_2, \dots, x_n) = (1/2\pi)^{n/2} \cdot \exp(-1/2 \cdot (x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2))$$

$$X_1 = h_1(Y_1, \dots, Y_n) = Y_1 \cdot \cos(Y_2)$$

$$X_2 = h_2(Y_1, \dots, Y_n) = Y_1 \cdot \sin(Y_2) \cdot \cos(Y_3)$$

•

•

•

$$X_n = h_n(Y_1, \dots, Y_n) = Y_1 \cdot \sin(Y_2) \cdot \dots \cdot \sin(Y_{n-1}) \cdot \sin(Y_n)$$

mit $Y_1 \in [0, \infty]$, $Y_2, \dots, Y_{n-1} \in [0, \pi]$ und $Y_n \in [0, 2\pi]$. Dann ist:

$$f_Y(y_1, \dots, y_n) = (1/2\pi)^{n/2} \cdot \sin(y_{n-1}) \cdot \dots \cdot \sin^{n-2}(y_2) \cdot y_1^{n-1} \cdot \exp(-1/2 \cdot y_1^2) \quad (3.2.6)$$

Die Verteilung von Y_1 lässt sich leicht realisieren (z.B. /3.9/, rule C25, C29), dagegen scheinen für Y_2, \dots, Y_n (gleichverteilte Richtung auf n-dimensionaler Einheitskugel) nur recht aufwendige Verfahren bekannt zu sein. Lediglich der Fall $n=2$ ist trivial, denn dann geht z.B.:

$$\begin{aligned} \delta_1 &= (-2 \cdot \ln(\xi_1))^{1/2} \cdot \cos(2\pi\xi_2) \\ \delta_2 &= (-2 \cdot \ln(\xi_1))^{1/2} \cdot \sin(2\pi\xi_2) \end{aligned} \quad (3.2.7)$$

Dieses Verfahren wird deshalb in den meisten Monte-Carlo-Codes und auch in dieser Arbeit verwendet.

Auch wenn bei der Festlegung eines Zufallsvektors $Y=(Y_1, \dots, Y_n)$ (anders als im Beispiel 3.2) die einzelnen Koordinaten voneinander abhängig sind, kann man dennoch auf die Methoden zur Erzeugung eindimensionaler Verteilungen zurückgreifen (/3.3/, /3.4/). Sei dazu $F(y_1, \dots, y_n)$ die zu erzeugende n-dimensionale Verteilungsfunktion, ferner:

$$F_1(y_1) = F(y_1, \infty, \dots, \infty) = p(Y_1(\omega) \leq y_1),$$

$$F_{2/1}(y_2|y_1) = p(Y_2(\omega) \leq y_2 | Y_1(\omega) = y_1),$$

$$F_{3/2}(y_3|y_1, y_2) = p(Y_3(\omega) \leq y_3 | Y_1(\omega) = y_1, Y_2(\omega) = y_2).$$

•
•
•

(3.2.8)

Wenn man nun zunächst eine Realisierung δ_1 der VF F_1 berechnet, diese in $F_{2/1}$ einsetzt und die so gewonnene, dann nur noch von y_2 abhängende VF realisiert, erhält man eine Zahl δ_2 . Analog ergibt sich δ_3 aus $F_{3/2}$ mit den bereits gewonnenen Zahlen δ_1 und δ_2 , u.s.w.. Der auf diese Weise erhaltene Vektor $\delta = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n)$ hat dann die gewünschte Verteilung. Die "bedingten VFn" (3.2.8) erhält man aus F (loc.cit.), es sind VFn

hinsichtlich des jeweils ersten Argumentes, und, falls Dichten existieren, sind dies die schon erwähnten "bedingten Dichten" (3.1.14).

Beispiel 3.3 Durch $f_R(x_R|x_I)$ sei die bedingte Verteilungsdichte für den Zustand x_R des reflektierten Teilchens gegeben, falls ein Teilchen im Zustand x_I auf eine Wand getroffen ist und dort ein Reflexionsprozeß stattgefunden hat. Wir beziehen die Geschwindigkeiten auf ein Polarkoordinatensystem und betrachten die Funktion:

$$f_R(|v_R|, \theta_R, \phi_R \parallel |v_I|, \theta_I, \phi_I). \quad (3.2.9)$$

Dabei seien $\theta_{i(r)}$ bzw. $\phi_{i(r)}$ die Polar- bzw. Azimutalwinkel gegen die Normale bzw. eine Tangente der reflektierenden Fläche im Auftreffpunkt (ϕ_i kann o.B.d.A. gleich Null gesetzt werden). In einfachen Reflexionsmodellen (z.B. in /0.6/, /0.7/ oder /0.8/) werden die Koordinaten $|v_R|$, θ_R und ϕ_R als stochastisch unabhängig betrachtet (in /0.6/ außerdem als unabhängig von θ_i). Der Monte-Carlo-Code "Marlowe" (/0.9/, /0.10/) simuliert dagegen die weiteren Bewegungen von auf einen Festkörper auftreffenden Testteilchen innerhalb des Festkörpers und liefert so in Abhängigkeit von $|v_i|$ und θ_i empirische VFn

$$F_R(|v_R|, \theta_R, \phi_R \parallel |v_i|, \theta_i).$$

In /0.10/ sind diese Resultate entsprechend dem o.a. Algorithmus umgeformt, und zwar werden dort sogar direkt die Inversen F_1^{-1} , F_2^{-1} , F_3^{-1} der bedingten VFn (3.2.8) tabelliert, so daß man nach der Inversionsmethode (3.2.3) setzen kann:

$$\begin{aligned} v_R &= F_1^{-1}(\xi_1, |v_i|, \theta_i) , \\ \cos(\theta_R) &= F_2^{-1}(\xi_1, \xi_2, |v_i|, \theta_i) , \\ \cos(\phi_R) &= F_3^{-1}(\xi_1, \xi_2, \xi_3, |v_i|, \theta_i) . \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

In /0.8/ ist solch ein Reflexionsmodell als zweite Option angegeben.

Beispiel 3.4 Wie schon in 3.1.3 beschrieben, muß zur Realisierung der Pfade des den Neutralgastransport beschreibenden stochastischen Prozesses aus den endlichdimensionalen VFn der zugehörigen projektiven Familie (3.1.12) gesammelt werden. Sieht man einmal davon ab, daß nach (3.1.13) ein Zustand x selbst aus mehreren stochastisch voneinander abhängenden Komponenten besteht, so zeigen die Gleichungen (3.1.15) zusammen mit dem o.a. Algorithmus, wie man vorzugehen hat. Es ist nämlich zunächst $f_1(x_1)$ zu realisieren, danach (im Markov-Falle) sukzessive $f_{2/1}(x_{i+1}|x_i)$, $i=1,2,\dots$, solange, bis der absorbierende Zustand $x_a=(m+1,\dots)$ eintritt.

3.2.2 GLEICHVERTEILTE ZUFALLSZAHLEN

Die Korrektheit von Monte-Carlo Ergebnissen ist streng verknüpft mit der Güte der Folge von Zufallszahlen ξ_1, ξ_2, \dots . Damit Resultate überhaupt reproduzierbar sind, verwendet man i.a. keine echten (z.B. aus einem geeigneten physikalischen Prozeß gewonnene) Zufallszahlen, sondern sogenannte "Pseudozufallszahlen", die in der Regel durch rekursive Algorithmen maschinell erzeugt werden. In zahlreichen Publikationen (z.B. /3.12/, /3.13/) sind solche Verfahren beschrieben, wir machen hier nur einige Bemerkungen zu dem am meisten benutzten Verfahren. Dies ist das durch:

$$\delta_{i+k} = \sum_{j=0}^{k-1} b_j \cdot \delta_{i+j} + \gamma \pmod{P}$$

$$\xi_{i+k} = \delta_{i+k} / P$$
(3.2.11)

definierte "Kongruenzverfahren". Bei den Rechnungen in dieser Arbeit wurden verwendet /3.49/:

$$k = 1, \quad b_0 = 843314861, \quad \delta = 1815266769, \quad P = 2^{31}.$$

Neben zahlentheoretischen Überlegungen sind statistische Testverfahren zur Untersuchung solcher Zahlenfolgen einzusetzen. Selbstverständlich kann man nicht alle (weil unendlich viele) Tests tatsächlich durchführen, der verbleibende Rest an Unsicherheit sollte möglichst klein gehalten werden. Um durch den Zufallsgenerator eingebrachte systematische Fehler in den Ergebnissen zu vermeiden, kann im entwickelten Rechencode zwischen

verschiedenen Kongruenzverfahren gewählt werden, die unterschiedlichen Ergebnisse können dann mittels Varianzanalyse auf "zufällige" oder systematische Abweichung getestet werden.

Prinzipiell ist die Güte einer durch (3.2.11) erzeugten Folge schon dadurch begrenzt, daß sie notwendigerweise periodisch ist. In /3.11/ ist darüber hinaus gezeigt, daß n -Tupel von mittels (3.2.11), $k=1$ erzeugte Zahlen den n -dimensionalen Einheitswürfel keineswegs gleichmäßig ausfüllen, sondern immer auf einer von höchstens $m=m(n,t)$ Hyperflächen liegen (t =Bit-Länge der Integer-Arithmetik der EDVA). Für den Fall $k>1$ läßt sich die Zahl der Hyperflächen zwar vergrößern, der Defekt des Generators der Form (3.2.11) kann jedoch prinzipiell nicht ganz beseitigt werden (/3.14/).

3.3 DER STOCHASTISCHE PROZEß UND DIE ZUGEHÖRIGE TRANSPORTGLEICHUNG

Mittels der Monte-Carlo-Verfahren wird das Verhalten der neutralen Teilchen innerhalb eines Volumens R durch einen stochastischen Prozeß beschrieben. Der Parameter t aus der Indexmenge stellt dann die Zeit dar, die seit der Entstehung eines Teilchens an der Quelle verstrichen ist (und darf nicht mit dem Wert der Zustandskomponente t^* verwechselt werden, die bei zeitlich inhomogenen Problemen für die Zeit steht). Wie schon in Kapitel 0.1 und 2.2 angedeutet, haben wir es nicht mit einem "rein unstetigen" Prozeß, aber auch nicht mit einem "rein stetigen"- oder Diffusionsprozeß zu tun, vielmehr wird die Zeitfunktion $(v(t), j(t))$ auf Grund der Stoßereignisse eine Sprungfunktion sein, während $r(t)$ bzw. $(r(t), t^*(t))$ sich stetig mit der Zeit t ändert.

Wenn das statistische Verfahren und der zugehörige Rechencode möglichst allgemein einsetzbar sein sollen, ist es unzweckmäßig, diesen Prozeß so genau wie möglich im Rechner nachzubilden, wie dies in offenbar allen bislang in der Fusionsforschung auf diesem Gebiet eingesetzten Programmen angestrebt wurde. Deshalb wird, wie dies auch schon in der

Neutronentransporttheorie geschehen ist (für die diese Verfahren ursprünglich entwickelt wurden) ausgehend von einer theoretischen Basis (hier: der Boltzmann-Gleichung) untersucht, welche anderen, einfacher und/oder ökonomischer zu realisierenden Prozesse die gleichen Resultate liefern. Dazu soll wie folgt vorgegangen werden: Zunächst wird der (i.a. verzweigte) stochastische Prozeß festgelegt, der in allgemeinsten Form das Verhalten der neutralen Komponente beschreiben soll. Für diesen Prozeß wird eine "Rückwärts"-Integralgleichung für Übergangswahrscheinlichkeiten abgeleitet. Nach einer Mittelung, einem Übergang zur adjungierten Integralgleichung und nach Einführung von Quelltermen wird in 3.3.2 dann die zugehörige Transportgleichung (Boltzmann-Gleichung in integraler Form) erhalten, aus dieser wiederum ein stochastischer Prozeß, der zwar als zum Ausgangsprozeß "analog" bezeichnet wird, der aber wesentlich einfacher zu simulieren ist, und der es vor allem unter Bezugnahme auf die Boltzmann-Gleichung gestattet, die Schätzverfahren als im statistischen Sinne korrekt ("erwartungstreu") nachzurechnen.

Dies wird in 3.3.3 für eine allgemeine Fredholmsche IGL skizziert und dann in 3.3.4 für die Berechnung des Neutralgastransportes in einem mit Plasma gefüllten Volumen (aber auch im Vakuum konkretisiert). Hierzu werden einige spezielle Schätzfunktionen hergeleitet, die im Rechencode eingesetzt sind. In 3.4 und 3.5 wird gezeigt, wie der analoge Prozeß je nach vorliegender Situation (in einen "nichtanalogen") abzuwandeln ist, um auch in so unterschiedlichen Fällen statistisch ökonomisch zu arbeiten, wie sie etwa bei Berechnungen für den Kern eines dichten und heißen Plasmas (sehr große Stoßdichte, praktisch Diffusionsnäherung möglich) und für die Kammer eines Divertors oder Pumpimiters (durch Wandprozesse und damit durch Gefäßgeometrie bestimmtes Transportverhalten) vorliegen. In 3.6 schließlich wird der "Geometrische Block" des Rechencodes beschrieben, damit wird dann gezeigt, welche geometrischen Verhältnisse mit dem Programm simuliert werden können.

Die Verfahren basieren auf den folgenden 4 Grundannahmen:

1. Die Eigenschaften des Mediums (Plasma), in dem der Neutralgastransport stattfindet, sind fest vorgegeben als Funktionen des Ortes und der Zeit, das Plasma selbst wird während des für den

Neutralgastransport maßgebenden Zeitintervalls nicht von der neutralen Komponente beeinflusst.

2. Die Dichte der neutralen Teilchen ist so klein, daß Wechselwirkungen der Neutralteilchen untereinander nicht berücksichtigt werden müssen.
3. Zwischen zwei Stößen bewegen sich die neutralen Teilchen deterministisch auf geraden Flugbahnen.
4. Die Teilchen der nächsten Generation (bei einem Stoßprozeß) entstehen am Stoßort sofort zum Stoßzeitpunkt.

Die berücksichtigten Wechselwirkungsprozesse, Quellenverteilung und Reflexionsmodelle sind praktisch nach Belieben austauschbar und die bei den Rechnungen in dieser Arbeit angenommenen sind im nachfolgenden Kapitel 4 beschrieben.

3.3.1 DER KASKADENPROZESS

Um zu einer möglichst allgemeinen Beschreibung der neutralen Komponente zu gelangen, soll einerseits berücksichtigt werden, daß das Neutralgas sich aus $m \geq 1$ verschiedenen Spezies zusammensetzt, daß andererseits ein Stoßereignis sowohl die Spezies verändern kann (z.B. nichtdiagonale Umladungstöße) als auch die Teilchenzahl (Ionisation, Dissoziation neutraler Moleküle, u.s.w.). Ein "random walk" kann also z.B. wie folgt aussehen: Ein HD-Molekül startet von einer Wandstelle ins Plasma (etwa mit einer der Wandtemperatur von 300-400 K entsprechende Energie) und wird im Plasma durch Elektronenstoß zu einem H- und einem D-Atom dissoziiert. Jedes dieser beiden Atome hat die Chance, sich durch Umladungsstöße in ein heißes (Plasmatemperatur) Neutrales irgendeiner im Plasma vertretenen Spezies zu verwandeln, um dann eventuell bei einem nachfolgenden Stoß mit einer Wand (Gefäß, Limiter oder Prallplatte) einerseits selbst reflektiert zu werden, andererseits aber auch ein neutrales

Verunreinigungsatom freizusetzen und auf diese Weise eine nächste Generation der Kaskade hervorzurufen.

Wären Orts- und Geschwindigkeitszustände diskret, dann könnte man jedem dieser Zustände die Teilchenzahlen der einzelnen Spezies zuordnen und hätte so eine sinnvolle Festlegung des "Zustandes der Kaskade" zu jedem Zeitpunkt. In diesem Fall ließen sich sofort die "Vorwärts-" und "Rückwärtsgleichungen" für diesen "rein un stetigen" Markovprozeß angeben (/3.15/, /3.16/, /3.17/, /3.18/) und aus der "Vorwärtsgleichung" wiederum die zugehörige Transportgleichung (Boltzmanngleichung). In unserem Fall (r und v kontinuierlich) müssen wir jedoch zu einem anderen Vorgehen, analog zu demjenigen in der "Fluktuationstheorie von Kaskadenprozessen" (/3.18/, /3.19/, /3.20/) greifen. In /3.20/ ist diese Theorie für Neutronenkaskaden in Kernreaktoren eingesetzt worden; das im nachfolgenden beschriebene Vorgehen ist ähnlich. Die zur Produktion von verzögerten Neutronen analogen Effekte entfallen, dafür haben wir es aber mit mehr als nur einer Spezies von "Teilchen" zu tun.

Um zu einer probabilistischen Beschreibung des Neutralgasverhaltens zu gelangen, beginnen wir mit der Definition für die Wahrscheinlichkeit:

$$W_k(x_0(t_0); i_1, v_1, i_2, v_2, \dots, i_k, v_k) dv_1 \dots dv_k dt_0 \quad k=1, 2, 3, \dots \quad (3.3.1)$$

Damit ist die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, daß ein Teilchen im Zustand $x_0(t_0) = (i_0, r_0, v_0, t_0)$ während des nachfolgenden Zeitintervalls $(t_0, t_0 + dt_0)$ einen Stoß erleidet, und daß aus diesem Stoß insgesamt k Teilchen hervorgehen, eines der Spezies i_1 im Geschwindigkeitselement $(v_1, v_1 + dv_1)$, u. s. w., eines schließlich in $(v_k, v_k + dv_k)$ mit dem Speziesindex i_k . Zur Vermeidung allzu häufiger Fallunterscheidungen schließen wir zunächst den Wert $m+1$ für den Speziesindex i (also den Zustand: "absorbiertes Teilchen") von der Betrachtung aus.

$W_{k=0}(x_0(t_0)) dt_0$ ist dann die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Teilchen absorbiert wird. Da im Endeffekt natürlich nicht die korrekte Verteilung der einzelnen Historien interessiert, sondern nur mittlere Teilchenzahlen in Zustandsraumelementen, müssen die u.U. vielparametrischen Funktionen W_k nicht vollständig angegeben werden, sondern es genügt die Bestimmung einiger Randverteilungen hiervon.

Zur Vereinfachung fassen wir noch die sich nur bei Stoßereignissen ändernden Variablen i und \mathbf{v} zu \mathbf{u} zusammen, also (mit (3.1.13b)):

$$\mathbf{x}(t) = (i, \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = (\mathbf{r}, \mathbf{u}, t) \text{ bzw. } \mathbf{x} = (i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = (\mathbf{r}, \mathbf{u}) \quad (3.3.2)$$

Die Wahrscheinlichkeit, daß überhaupt ein Stoß stattfindet, ist:

$$\alpha_{\text{tot}}(\mathbf{x}_0(t_0))dt_0 = \sum_k \int d\mathbf{u}_1 \int d\mathbf{u}_2 \dots \int d\mathbf{u}_k W_k(\mathbf{x}_0(t_0); \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k) dt_0 \quad (3.3.3)$$

und

$$w_k(\mathbf{x}_0(t_0); \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_k) = W_k(\mathbf{x}_0(t_0); \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k) / \alpha_{\text{tot}}(\mathbf{x}_0(t_0)) \quad (3.3.4)$$

ist die bedingte VD für die Zustandskomponenten $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k$, falls in $\mathbf{x}_0(t_0)$ ein Stoß stattgefunden hat. Sei ferner:

$$\rho_0(t) = (i_0, \mathbf{r}_0 + t \cdot \mathbf{v}_0, \mathbf{v}_0, t_0 + t) \quad (3.3.5)$$

derjenige Zustand, in den $\mathbf{x}_0(t_0)$ nach Verstreichen der Zeit t übergeht, wenn kein Stoßprozeß stattgefunden hat. Dann ist:

$$F[\mathbf{x}_0(t_0); \rho_0(t)] = \exp\left\{-\int_0^t dt' \alpha_{\text{tot}}(\rho_0(t'))\right\} \quad (3.3.6)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Flugdauer des im Zustand $\mathbf{x}_0(t_0)$ befindlichen Teilchens bis zum nächsten Stoßpunkt jedenfalls größer als t ist (Wechselwirkungen mit den Begrenzungen eines endlichen Volumens sind zunächst außer Acht gelassen). Daraus folgt, daß mit

$$T[\mathbf{x}_0(t_0) \rightarrow \rho_0(t)] = \alpha_{\text{tot}}(\rho_0(t)) \cdot F[\mathbf{x}_0(t_0); \rho_0(t)] \quad (3.3.7)$$

die Verteilungsdichte (zunächst bis auf Normierung) für die Flugdauer t eines in Zustand $\mathbf{x}_0(t_0)$ startenden Teilchens bis zum nächsten Stoß gegeben ist.

Anstatt $\alpha_{\text{tot}}(\mathbf{x}(t))$ wird oft auch $\Sigma_{\text{tot}}(\mathbf{x}(t)) = \alpha_{\text{tot}}(\mathbf{x}(t)) / |\mathbf{v}|$ verwendet, eine Größe, für die sich in der Literatur trotz der Dimension Länge⁻¹ die Bezeichnung "totaler makroskopischer Querschnitt" eingebürgert hat.

Er läßt sich (ebenso wie entsprechend α_{tot} , W_k oder w_k) als aus "partiellen makroskopischen Querschnitten", z.B. $\Sigma_{\text{tot}} = \Sigma_{\text{tot}} + \Sigma_{\text{cx}} + \Sigma_{\text{diss}}$, für einzelne Stoßprozesse (hier: Ionisation, Umladung und Dissoziation) zusammengesetzt denken. Ist also s ein Index für die Art des Stoßprozesses, dann ist:

$$W_k = \sum_s W_k^s \quad \text{und} \quad \alpha_{\text{tot}} = \sum_s \alpha_s \quad . \quad (3.3.8)$$

Um als Verteilungsdichte für t verwendet werden zu können, muß die Funktion T für jedes feste $x_0(t_0)$ als Funktion von t auf Eins normiert sein. Dies läßt sich wie folgt sicherstellen: Das Gefäß, in welchem sich das Gas befinden soll, sei wieder durch das Volumen R im \mathbb{R}^3 gegeben, der Rand sei die Fläche S . R_K sei ein (für stärker analytisch als hier durchgeführte Behandlungen zweckmäßigerweise konvex gewähltes) Volumen, das R umfaßt, mit dem Rand S_K .

Da nur Lösungen innerhalb R gesucht sind, setzen wir alle Funktionen W_k und die noch zu definierenden Quellverteilungen Q außerhalb von R_K Null. (Integrale über R_K können dann auch über den ganzen \mathbb{R}^3 erstreckt werden.) Darüberhinaus werden nur Quellverteilungen innerhalb R (einschließlich Rand) betrachtet, auf dem Rand jedoch nur solche, die nach innen gerichtet sind. Formal gilt für solche "Oberflächenquellen Q_S ":

$$Q(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = Q_S(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \cdot \delta(s) \quad , \quad \mathbf{r} \in S$$

$$Q_S(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = 0 \quad \text{falls} \quad \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_r > 0$$

\mathbf{n}_r ist dazu die nach außen gerichtete Normale im Punkt $\mathbf{r} \in S$, s ist eine Koordinate senkrecht zu S im Punkte \mathbf{r} .

Ferner nehmen wir an, daß mindestens eines unter den W_k einen von Wandstößen herrührenden Anteil W_k^{Wand} in der Zerlegung (3.3.8) enthält. Der hierdurch bewirkte Sprung auf Eins in der Stoßwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von t drückt sich in der Dichte W_k durch den Anteil

$$w_k^{\text{Wand}}(x_0(t_0); u_1, \dots, u_k) = \delta(t - t_{\text{max}}) \cdot w_k^{\text{Wand}}(x_0(t_0); u_1, \dots, u_k) \quad (3.3.9)$$

aus. w_k^{Wand} legt dabei das Reflexionsmodell (in Abhängigkeit vom Zustand $x_0(t_0)$ des auftreffenden Teilchens) fest. Öffnungen im Gefäß (Divertorschlitze, Pumpstutzen, u.s.w.) werden als ideal absorbierende Zonen (also $w_0^{\text{Wand}}=1$ für solche r_0) erfaßt.

t_{max} ist die Flugdauer eines bei $x_0(t_0)$ startenden Teilchens bis zur nächsten Wand in Flugrichtung. Durch den zusätzlichen Stoßprozeß ergibt sich nun

$$F[x_0(t_0); \rho_0(t)] = \begin{cases} 0 & t \geq t_{\text{max}} \\ \exp\{-\int_0^t \alpha_{\text{tot}}(\rho_0(t')) dt'\} & t < t_{\text{max}} \end{cases} \quad (3.3.6a)$$

und deshalb ist wegen

$$1 - F[x_0(t_0); \rho(t)] = \int_0^t T[x_0(t_0) \rightarrow \rho_0(t')] dt' \quad (3.3.7a)$$

mit diesen Vereinbarungen T tatsächlich auf Eins normiert. Diese Art, die Randbedingungen zu beschreiben, ist bei numerischen Verfahren nicht angebracht, weil der zusätzliche (singuläre) Stoßprozeß den Kern der zu lösenden Integralgleichung noch komplizierter macht. Randbedingungen (Reflexionsmodelle) werden deshalb dort zusätzlich zur IGL formuliert und durch einen Iterationsprozeß approximativ erfüllt (/3.21/-/3.23/). Bei den hier anzuwendenden statistischen Verfahren ist zur Vermeidung der Iteration der Einbau der Randbedingungen in den Kern dagegen aus ökonomischen Gründen unumgänglich.

Durch obige Vereinbarungen ist gewährleistet, daß (fast sicher) kein Teilchen bis zu dem Rand S_K gelangt, es handelt sich also um einen Prozeß "mit natürlichen Rändern" (/3.18/), und es brauchen auf S_K keine Randbedingungen erfüllt werden.

Für das Folgende werden noch zwei Definitionen benötigt:

$$1. \quad p(x_0(t_0); v_1, v_2, \dots, v_m) \tag{3.3.10}$$

sei die (bedingte) Wahrscheinlichkeit dafür, falls in $x_0(t_0)$ ein Stoß stattgefunden hat, daß aus diesem v_1 Teilchen der Spezies 1, u.s.w. und v_m Teilchen der Spezies m hervorgehen. Man erhält diese Funktion durch Integration derjenigen Funktion w_k über alle Geschwindigkeiten v_1, \dots, v_k , für die $k=v_1+v_2+\dots+v_m$ gilt.

$$2. \quad w(x_0(t_0), i; v) dv \tag{3.3.11}$$

sei noch die Wahrscheinlichkeit, daß bei einem Stoß in $x_0(t_0)$, aus dem mindestens ein Teilchen der Spezies i hervorgeht, mindestens ein Teilchen eben dieser Spezies im Geschwindigkeitselement $(v, v+dv)$ auftaucht.

Nun soll festgelegt werden, was mit dem "Zustand der Kaskade zum Zeitpunkt t" gemeint ist.

Dazu sei (r, v) ein Punkt des Phasenraumes mit $r \in \mathbb{R}^3$, ferner:

$$V_1 = \{(r', v') \mid r' \leq r, v' \leq v\} \tag{3.3.12}$$

Jede der 6 Komponenten $(r_x', r_y', r_z', v_x', v_y', v_z')$ kann entweder größer oder nicht größer als die entsprechende Komponente von (r, v) sein. Auf diese Weise erhält man also eine disjunkte Zerlegung des Phasenraumes in 2^6 Teilstücke, deren erstes gerade V_1 sei. (V_2 sei z.B. analog zu V_1 definiert, lediglich sei $r_x' > r_x$ u.s.w.). Der $2^6 \cdot m$ -dimensionale Vektor $m(t)$

$$m(t) = (m_{1,1}, \dots, m_{1,m}, m_{2,1}, \dots, m_{2^6,m}) \tag{3.3.13}$$

soll denjenigen Zustand kennzeichnen, in dem sich zur Zeit t genau $m_{i,v}$ Teilchen der Spezies v im Phasenvolumen V_i befinden.

Wieder mit $x_0(t_0) = (i_0, r_0, v_0, t_0)$ sei nun

$$H(x_0(t_0); m(t)) \quad (3.3.14a)$$

die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen im Zustand $x_0(t_0)$ nach einer Zeitspanne $t-t_0$ den Kaskadenzustand $m(t)$ ausgebildet hat. Wären diese "Übergangswahrscheinlichkeiten" bekannt, dann ließen sich daraus alle die neutrale Komponente im Plasma betreffenden Größen berechnen.

Um die Gleichung für H angeben zu können, zerlegen wir H in

$$H = H_a + H_0 + H_{sc} \quad (3.3.14b)$$

Die einzelnen Summanden gehen aus H durch Bedingungen an den ersten Stoß nach dem Zustand $x_0(t_0)$ hervor. Bei H_a ist diese Bedingung, daß bei dem ersten Stoß, der vor der Zeit t eingetreten sein muß, das Teilchen absorbiert wurde. Die Bedingung für H_0 ist, daß bis zur Zeit t kein Stoß stattfand; für H_{sc} bleibt die Bedingung, daß zumindest aus dem ersten Stoß, der vor der Zeit t geschehen sein muß, mindestens ein Teilchen hervorging.

Fassen wir in (3.3.8) alle diejenigen α_s zu α_a zusammen, bei denen s für einen zu Teilchenabsorption führenden Stoßprozeß steht, also $\alpha_{tot} = \alpha_a + \alpha_{sc}$, dann ergibt sich:

$$H_a(x_0(t_0); m(t)) = \delta_{0, m(t)} \cdot \int_{t_0}^t dt' F[x_0(t_0); \rho_0(t'-t_0)] \cdot \alpha_a(\rho_0(t'-t_0)) \quad (3.3.15)$$

mit dem für Vektoren verallgemeinerten Kroneckersymbol

$$\delta_{n, m} = 1, \text{ falls } n = m \text{ und Null sonst.}$$

Ebenfalls stark singular ist die Verteilung H_0 :

$$H_0(x_0(t_0); m(t)) = \delta_{\rho_0(t-t_0), m(t)} \cdot F[x_0(t_0); \rho_0(t-t_0)] \quad (3.3.16)$$

mit der Abkürzung $\delta_{x(t_1), m(t_2)} = 1$, falls der Kaskadenzustand $m(t_2)$ ein "Einteilchenzustand" ist, wenn also $m(t_2)$ aus lauter Nullen und einer

Eins besteht, und wenn ferner dieser Einteilchenzustand identisch mit dem Zustand $x(t_1)$ ist (in allen anderen Fällen wird der Wert Null angenommen).

Für H_{sc} ergibt sich schließlich (unter der Berücksichtigung des Markov-Charakters des Prozesses, demzufolge ein aus einem Stoß hervorgehendes Teilchen unabhängig von der Vorgeschichte und den anderen Teilchen selbst Ausgangspunkt einer neuen eigenen Kaskade ist):

$$\begin{aligned}
 H_{sc}(x_0(t_0); m(t)) &= \int_{t_0}^t dt' \alpha_{sc}(\rho_0(t'-t_0)) * F[x_0(t_0); \rho_0(t'-t_0)] * \\
 &\times \sum_{v_1, v_2, \dots, v_m} p(\rho_0(t'-t_0); v_1, \dots, v_m) * \\
 &\times \sum_{m(t)=m_1(t)+\dots+m_m(t)} \prod_{j=1}^m H^*(\rho_0(t'-t_0), v_j; m_j(t))
 \end{aligned}
 \tag{3.3.17}$$

Hierbei ist durch $H^*(x(t_1), v_j; m(t_2))$ die Wahrscheinlichkeit gegeben, daß, falls im Zustand $x(t_1)$ ein Stoßereignis eintrat und aus diesem (ev. neben weiteren Teilchen anderer Spezies) v_j Teilchen der Spezies j hervorgingen, diese v_j Teilchen zum späteren Zeitpunkt t_2 den Kaskadenzustand m_j bewirken. Wegen der Unabhängigkeit der einzelnen Teilchen ist dann

$$\begin{aligned}
 H^*(x(t_1), v_j; m(t_2)) &= \sum_{m(t_2)=m_1(t_2)+\dots+m_{v_j}(t_2)} \prod_{l=1}^{v_j} \int d v^l * \\
 &\times w(x(t_1), j; v^l) * H(j, r, v^l, t_1; m_l(t_2))
 \end{aligned}
 \tag{3.3.18}$$

(3.3.18) eingesetzt in (3.3.17), dies dann wieder zusammen mit (3.3.15) und (3.3.16) eingesetzt in (3.3.14) stellt eine "Rückwärts-Integralgleichung" für die Funktion H dar, "Rückwärts" deshalb, weil sich die Bedingungen bei der Zerlegung von H auf den ersten Stoßprozeß nach dem zeitlich früheren der beiden Zustände $x_0(t_0)$ und $m(t)$ bezogen und nicht, was hier gar nicht möglich gewesen wäre, auf den letzten vor dem zeitlich später liegenden.

3.3.2 DIE ZUGEHÖRIGE TRANSPORTGLEICHUNG

Wie schon erwähnt, ist weniger die Funktion H selbst von Interesse als vielmehr nur einige ihrer Mittelwerte. Um diese zu erhalten, kann man sich wie immer bei diskreten Verteilungsfunktionen der "erzeugenden Funktion" bedienen, die im vorliegenden Fall durch

$$G(x_0(t_0); \mathbf{q}, t) := \sum_{\mathbf{m}(t)} \exp(\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{q}) \cdot H(x_0(t_0); \mathbf{m}(t)) \quad (3.3.19)$$

definiert ist. \mathbf{q} ist dabei ein $2^{6 \cdot m}$ -dimensionaler Vektor

$$\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_{2^{6 \cdot m}}) \quad (3.3.20)$$

Die Momente von H berechnen sich dann aus den Ableitungen von G . Wir benötigen nur einige erste Momente, deshalb sei jetzt speziell

$$\mathbf{q}_i = (0, \dots, 0, q_i, 0, \dots, 0) \text{ mit } 1 \leq i \leq m \quad (3.3.21)$$

(mit q_i an der i -ten Stelle), ferner

$$G_i(x_0(t_0); \mathbf{q}, t) := G(x_0(t_0); \mathbf{q}_i, t). \quad (3.3.22)$$

Dann ist nämlich

$$M(x_0(t_0); i, V_1, t) = \partial G_i(x_0(t_0); \mathbf{q}, t) / \partial q_i |_{q_i=0} \quad (3.3.23)$$

die mittlere Anzahl von neutralen Teilchen der Spezies i im Phasenraumvolumen V_1 (definiert in (3.3.12)) zur Zeit t , falls zu früheren Zeitpunkt t_0 nur genau ein Teilchen im Zustand $x_0(t_0)$ vorhanden war.

Nun läßt sich die zugehörige Transportgleichung angeben. Dazu seien G und G_i analog wie H in (3.3.14) zerlegt, also

$$G_{(i)} = G_{(i),a} + G_{(i),0} + G_{(i),sc} \quad (3.3.14a)$$

(3.3.15), eingesetzt in (3.3.19), ergibt unter Berücksichtigung von (3.3.21) für M den Beitrag

$$\partial G_{i,a} / \partial q_i |_{q_i=0} = 0 \quad (3.3.24)$$

und für den "ungestoßenen Beitrag" zu M erhält man:

$$\partial G_{i,0} / \partial q_i |_{q_i=0} = \Delta(\rho_0(t-t_0); i, v_1, t) \cdot F[x_0(t_0); \rho_0(t-t_0)] \quad (3.3.25)$$

mit $\Delta(x(t_1); i_2, v, t_2) = 1$, falls $i=i_2$, $t_1=t_2$ und $(r, v) \in V$, in allen anderen Fällen ist der Wert Null.

Eine Formel für G_{sc} ergibt sich durch Einsetzen von (3.3.17) in (3.3.19) zunächst zu:

$$\begin{aligned} G_{sc}(x_0(t_0); q, t) = & \int_{t_0}^t dt' \alpha_{sc}(\rho_0(t'-t_0)) \cdot F[x_0(t_0); \rho_0(t'-t_0)] \times \\ & \times \sum_{v_1, v_2, \dots, v_m} p(\rho_0(t'-t_0); v_1, \dots, v_m) \times \\ & \times \prod_{j=1}^m \sum_{m_j(t)} \exp(m(t) \cdot q) \cdot H^*(\rho_0(t'-t_0), v_j, m(t)) \end{aligned} \quad (3.3.26)$$

Hierzu sind die beiden Summen $\sum_{m(t)}$ und $\sum_{m_1(t)+\dots+m_m(t)=m(t)}$ zu nur

einer Summe $\sum_{m_1(t), \dots, m_m(t)}$ zusammengefaßt, dann lassen sich nämlich

nach Zerlegung der Exponentialfunktion in einzelne Faktoren auch die Summen- und Produktbildung in oben angegebener Weise vertauschen. Exakt die gleiche Überlegung, angewandt auf (3.3.18), führt zu

$$\prod_{j=1}^m \left\{ \int d v' w(\rho_0(t'-t_0), j; v') \cdot G(j, r_0 + (t'-t_0)v_0, v', t'; q, t) \right\}^{v_j} \quad (3.3.27)$$

für die letzte Zeile von (3.3.26).

Setzt man nun zur Berechnung von $\partial G_{i,sc} / \partial q_i |_{q_i=0}$ wieder alle außer der i-ten Komponente von q gleich Null und differenziert (3.3.27) nach q_i (nur

auf diesen Teil von (3.3.26) wirkt nämlich der Differentialoperator), so erhält man unter Berücksichtigung von $G(x(t_1); \mathbf{0}, t_2) = 1$ (nach 3.3.19):

$$\sum_{j=1}^m v_j \int d\mathbf{v}' w(\rho_0(t'-t_0), j, \mathbf{v}') \cdot M(j, \mathbf{r}_0+(t'-t_0)\mathbf{v}_0, \mathbf{v}', t'; i, V_1, t) \quad (3.3.28)$$

Vertauscht man die hier auftretende Summation über j noch mit der Summation in der zweiten Zeile von (3.3.26), dann bleibt für den von Stößen herrührenden Anteil M_{sc} zu M der Ausdruck:

$$\begin{aligned} M_{sc}(x_0(t_0); i, V_1, t) &= \int_{t_0}^t dt' \alpha_{sc}(\rho_0(t'-t_0)) \cdot F[x_0(t_0); \rho_0(t'-t_0)] \times \\ &\times \sum_{j=1}^m n_j(\rho_0(t'-t_0)) \int d\mathbf{v}' w(\rho_0(t'-t_0), j; \mathbf{v}') \times \\ &\times M(j, \mathbf{r}_0+(t'-t_0)\mathbf{v}_0, \mathbf{v}', t'; i, V_1, t) \end{aligned} \quad (3.3.29)$$

wobei noch die Abkürzung n_j für die mittlere Anzahl der aus einem Stoß hervorgehenden Teilchen der Spezies j einging, explizit also:

$$n_j(x(t)) = \sum_{v_1, v_2, \dots, v_m} v_j \cdot p(x(t); v_1, \dots, v_m) \quad (3.3.30)$$

Die Gleichung für M läßt sich unmittelbar umschreiben in eine Gleichung für die mittlere Dichte n zur Zeit t , die sich aus einem Einteilchenzustand zur Zeit t_0 aufgebaut hat. Es ist:

$$M(x_0(t_0); i, V_1, t) = \int_{V_1} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{v}_1 n[x_0(t_0); i, \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t] \quad (3.3.31)$$

Läßt man auf beiden Seiten der Gleichung für M die Integration über V_1 fort, so ergibt sich in etwa kompakterer Form:

$$\begin{aligned} n[x_0(t_0); x(t)] &= F[x_0(t_0); \rho_0(t-t_0)] \cdot \delta(\rho_0(t-t_0), x(t)) \\ &+ \int_{t_0}^t dt' T[x(t_0) \rightarrow \rho_0(t'-t_0)] \times \\ &\times \int d\mathbf{u}' C[\rho_0(t'-t_0) + \mathbf{u}'] \cdot n[x'(t'); x(t)] \end{aligned} \quad (3.3.32)$$

mit den Abkürzungen:

$\mathbf{u} = (i, \mathbf{v})$ (wie schon vorher)

$\mathbf{x}'(t') = (i', \mathbf{r}_0 + (t' - t_0)\mathbf{v}_0, \mathbf{v}', t')$

(3.3.33)

$C[\mathbf{x}(t) \rightarrow i_1, \mathbf{v}_1] = \alpha_{sc}(\mathbf{x}(t)) / \alpha_{tot}(\mathbf{x}(t)) * n_{i_1}(\mathbf{x}(t)) * w(\mathbf{x}(t)), i_1; \mathbf{v}_1)$

(3.3.34)

Neben dem "Transportkern" T (3.3.7) und (3.3.7a), durch den der Übergang von einem Raumpunkt zum nächsten vermittelt wird, ist nun der "Stoßkern" C angegeben, der nach Normierung bei festen Orts- und Zeitkoordinaten den stoßbedingten Übergang zu anderen Geschwindigkeitskoordinaten und evt. neuem Speziesindex beschreibt. Wie zunächst T (in (3.3.7)) ist auch i.a. C noch nicht auf Eins normiert. Der Normierungsfaktor $c(\mathbf{x}(t))$ ist:

$$c(\mathbf{x}(t)) = \int d\mathbf{u}_1 C[\mathbf{x}(t) \rightarrow \mathbf{u}_1]$$

(3.3.35)

und bedeutet physikalisch die mittlere Anzahl von Teilchen, die aus einem Stoßprozeß in $\mathbf{x}(t)$ hervorgehen.

Falls in einem Raumpunkt \mathbf{r} bzw. \mathbf{r}, t Teilchenmultiplikation nicht vorkommt, wenn also dort $\sum_i n_i = 1$ gilt, dann ergibt sich unmittelbar aus (3.3.34) und (3.3.35):

$$c(\mathbf{x}(t)) = \alpha_{sc}(\mathbf{x}(t)) / \alpha_{tot}(\mathbf{x}(t)) =: p_{sc}(\mathbf{x}(t))$$

(3.3.36)

und

$$p_a(\mathbf{x}(t)) := 1 - p_{sc}(\mathbf{x}(t)) = \alpha_a(\mathbf{x}(t)) / \alpha_{tot}(\mathbf{x}(t))$$

(3.3.37)

$p_a(\mathbf{x}(t))$ und $p_{sc}(\mathbf{x}(t))$ ist die Absorptionswahrscheinlichkeit bzw. die "Überlebenswahrscheinlichkeit" bei einem Stoß in $\mathbf{x}(t)$, und i.a. kann also $c(\mathbf{x}(t)) \neq p_{sc}(\mathbf{x}(t))$ sein.

In (Kap 3.1.3) hatten wir den Zustand, in den ein Teilchen bei Absorption übergeht, durch den Wert $m+1$ des Speziesindex gekennzeichnet. Damit können wir C fortsetzen und normieren zu:

$$C[x(t) \rightarrow i_1, v_1] = p_a(x(t)) \cdot \delta_{i_1, m+1} \cdot h(v_1) + p_{sc}(x(t)) \times \\ \times C[x(t) \rightarrow i_1, v_1] / c(x(t)) \quad (3.3.38)$$

(Durch geeignete Wahl von $C(m+1, \dots \rightarrow \dots)$ ist natürlich zu erreichen, daß ein absorbierender Zustand nicht mehr verlassen wird; $h(v)$ ist eine beliebige VD). C ist die bedingte Dichte, durch die die Übergänge in andere Zustände durch Stoßprozesse beschrieben werden. Es sei hier schon erwähnt, daß im entwickelten Rechencode zur Berechnung des Neutralgasverhaltens, nachdem ein Startzustand $x_0(t_0)$ festgelegt ist, solange immer abwechselnd die VDN T und C (genau genommen: C) nach den in Kap. 3.2 beschriebenen Verfahren maschinell realisiert werden, bis erstmals ein Zustand $(m+1, \dots)$ eintritt. Dann beginnt die nächste Historie.

Um den Erwartungswert von den noch zu definierenden Schätzfunktionen berechnen zu können, müssen noch einige Bemerkungen angeführt werden.

Ist eine Anfangsverteilungsdichte $n_{t_0}(i_0, r_0, v_0)$ gegeben, dann ist:

$$\psi(x(t)) = \int d r_0 d u_0 n_{t_0}(r_0, u_0) \cdot n[r_0, u_0, t_0; x(t)] \quad (3.3.39)$$

die daraus resultierenden Dichtefunktion, falls in der Zeit von t_0 bis t keine Quellen für Neutralgas vorhanden sind. Die Transportgleichung für diese Funktion ψ (die Boltzmann-Gleichung) in integraler Form erhält man aus (3.3.32), indem man einerseits den Beitrag von eventuell vorhandenen Quellen noch mit in die Gleichung aufnimmt, andererseits zum adjungierten Integraloperator übergeht. Dieser Übergang ist nötig, weil Transportgleichungen durch Mittelung aus den "Vorwärtsgleichungen" von Stochastischen Prozessen entstehen, während sich aus den in der Regel (wie auch hier) leichter herzuleitenden "Rückwärtsgleichungen" die "adjungierten Transportgleichungen" ergeben (/3.20/, /3.24/, /3.25/). Wenn man (3.3.32) über alle möglichen Zustände $x(t)$, t fest, integriert, entsteht die adjungierte IGL und daraus die äquivalente "Adjungierte" zur Boltzmann-Gleichung in integrodifferentialer Form. Obwohl diese Gleichungen für die allgemeine Monte-Carlo Theorie eine große Bedeutung haben (siehe auch Kap. 3.5), wird hier nur die Boltzmann-Gleichung selbst benutzt, und diese auch nur in der stark reduzierten Schreibweise:

$$\psi(x) = S(x) + \int dx' K(x' \rightarrow x) \cdot \psi(x') \quad (3.3.40)$$

Der Kern K ist dabei im wesentlichen das Produkt von C (3.3.34) und T , integriert wird über den ganzen Zustandsraum E (3.1.13). Ausgeschrieben bedeutet das:

$$\begin{aligned} K[i', r', v', t' \rightarrow i, r, v, t] = & C[i', r', v', t' \rightarrow i, v] \cdot c(i', r', v', t') \times \\ & \times ch(t-t') \cdot \alpha_{tot}(i', r', v', t') / \alpha_{tot}(i, r, v, t) \times \\ & \times T[i, r', v, t' \rightarrow r, t] \cdot \delta(r', r - (t-t')v) \end{aligned} \quad (3.3.41)$$

Die δ -Distribution und die Sprungfunktion $ch(t)$:

$$ch(t) = 1 \text{ falls } t \geq 0 \text{ und Null sonst}$$

erweitern den Transportkern T in naheliegender Weise so, daß das Integral $\int dt' \int d u$ nun über den ganzen Zustandsraum E erstreckt werden kann (nur für die durch obige δ -Distribution und die Funktion $ch(t)$ ausgezeichneten Zustände war in (3.3.7) überhaupt der Kern T definiert worden).

Der Beitrag $S(x)$ zu $\psi(x)$ derjenigen Teilchen, die noch keinen Stoß erfahren haben, setzt sich i. a. zusammen aus:

$$S(x) = S_{init}(x) + S_Q(x) \quad , \quad S(m+1, r, v, t) = 0. \quad (3.3.42)$$

S_{init} ist dabei der von einer Anfangsverteilung bei $t=0$ herrührende Anteil, also (erste Zeile von (3.3.32) sowie (3.3.39))

$$S_{init}(x) = n_{t=0}(i, r-tv, v) \cdot F[i, r-tv, v; i, r, v, t] \quad (3.3.42a)$$

Ferner sei $Q(x)$ eine Quellenverteilungsdichte, d.h.

$$Q(i, r, v, t) drdv \quad (3.3.43)$$

sei die Anzahl der Teilchen der Spezies i , die pro Zeiteinheit im Phasenraumelement $drdv$ um r, v entstehen. Eine ("nach innen gerichtete") Oberflächequelle auf dem Rand S von R kann in der Form

$$Q(i, r, v, t) = Q_S(i, r, v, t) \cdot \delta(s) \quad (3.3.44)$$

darin enthalten sein (s ist eine Koordinate senkrecht zur Oberfläche in r). Solche Quellterme sind z.B. gegeben durch Strahlungsrekombination oder die Bildung von "Halo-Neutralen" bei Plasmaheizung durch hochenergetische Neutralteilchenstrahlen (Volumenquellen). Alle Prozesse von Plasmateilchen an den umgebenden Wänden (auch Prallplatten), die zu Neutralteilchen führen, stellen Oberflächenquellen dar.

Für den "ungestoßenen" Beitrag dieser Quellen zur mittleren Dichte ψ ergibt sich mit (3.3.6) also:

$$S_Q(x) = \int dx' Q(x') \cdot F(x', x) \quad (3.3.42b)$$

wobei zur Vereinfachung der Schreibweise die Funktion F durch Aufnahme von δ -Funktionen (analog zu T in (3.3.41)) so erweitert sei, daß sie nicht mehr nur wie in (3.3.6) für in Flugrichtung des Zustandes x rückwärts liegende Zustände x' sondern für beliebige Paare x' und x definiert ist (also auch noch die Faktoren $\delta(v' - v)$ und $\delta_{i', i}$ enthält).

3.3.3 DER ALLGEMEINE MONTE-CARLO-ALGORITHMUS

Die IGL (3.3.40) ist eine Fredholsche Integralgleichung zweiter Art. Nach (Kap. 3.1.3) wird ein stochastischer Prozeß durch Angabe einer Startverteilungsdichte und einer projektiven Familie endlichdimensionaler Verteilungen festgelegt. Weil die Pfade im Rechner realisiert werden sollen, muß zusätzlich noch eine Abbruchwahrscheinlichkeit angegeben werden. Dazu ist genau das gleiche Vorgehen nötig, wie bei der Anwendung dieser Verfahren auf Neutronen- oder Photonentransport, dies ist schon oft beschrieben worden (z.B. /3.3/, /3.4/, /3.7/) und soll im folgenden kurz zusammengefaßt werden. Ausgangspunkt ist also eine Gleichung (siehe (3.3.40) für unseren konkreten Anwendungsfall):

$$\psi(x) = S(x) + \int dx' K(x' \rightarrow x) \cdot \psi(x') \quad . \quad (3.3.45)$$

S und K seien dabei nichtnegative Funktionen, S und ψ mögen ferner Elemente aus dem Banachraum $L_1(E)$ aller über den ganzen Zustandsraum E integrierbaren Funktionen sein, für die dieses Integral endlich ist (die also beschränkt sind in der üblichen Norm des L_1).

Die auf Eins normierte Inhomogenität $S^*(x)$ wird als Startverteilungsdichte gewählt und o.B.d.A. sei S^* die Inhomogenität von (3.3.45), also:

$$f_1(x) = S^*(x) \quad , \quad \text{mit } S^* = S/S \quad \text{und } S = \int dx S(x) \quad (3.3.46a)$$

Ferner sei A ein Teil des Zustandsraumes E mit $S(x)=0$, $K(x_0 \rightarrow x)=0$ für $x_0 \in E-A$, $x \in A$. Falls eine solche Teilmenge A nicht existiert, kann E immer durch die sogenannte "Alexandroff'sche Einpunkt-Kompaktifizierung" erweitert und K und S geeignet fortgesetzt werden /3.9/. Anstelle dieser topologischen Konstruktion hatten wir in Kap. 3.1.3 eine zwar formal etwas weniger elegante, dafür aber durch die notwendige Vergrößerung des Zustandsraumes auf Grund mehrerer Teilchensorten im Modell sehr nahegelegte Erweiterung (Speziesindex m+1) gewählt, die sich zudem ganz innerhalb des ohnehin benötigten mathematischen Rahmens formulieren ließ.

Die Funktion h(x) mit $h(x)=0$ falls $x \notin A$ sei eine beliebige VD auf A. Durch

$$f_{2/1}(x_1 \rightarrow x_2) = p_a(x_1) \cdot h(x_2) + p_{sc}(x_1) \cdot K(x_1 \rightarrow x_2) / c(x_1) \quad (3.3.46b)$$

sei die bedingte Dichte von x_2 bei gegebenem x_1 definiert. Dabei sei $p_a(x)$ die Abbruchwahrscheinlichkeit, wieder

$$p_{sc} = 1 - p_a,$$

sowie

$$c(x) = \int dx' K(x \rightarrow x') \quad (3.3.47)$$

eine Normierungsfunktion.

Die Wahrscheinlichkeit $p_a(x)$ kann fast beliebig gewählt werden; lediglich ist

$1 - p_a(x) = p_{sc}(x) = 0$, falls $c(x) = 0$
zu beachten.

Für die praktische Simulation des Prozesses auf einer EDVA ist noch eine weitere Einschränkung nötig, damit die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten unendlich langer Ketten gleich Null wird. Besonders anschaulich wird der Simulationsvorgang im für uns interessanten Fall des Neutralgastransportes, wenn man für $p_a(x)$ die Ionisationswahrscheinlichkeit bei einem Stoß in x bzw. die Absorptionswahrscheinlichkeit bei einem Wandprozeß verwendet.

Mit der Wahrscheinlichkeit $p_a(x)$ findet also ein Übergang in einen absorbierenden Zustand $x_2 \in A$ statt, andernfalls wird durch K ein Übergang in den Zustand $x_2 \in E-A$ vermittelt. In unserem Anwendungsfall entspricht A nach dem oben Gesagten der durch den Speziesindex $m+1$ gekennzeichneten Teilmenge, die künstlich zum Zustandsraum hinzugenommen wurde, um den Absorptionsprozeß einfacher beschreiben zu können.

Man kann in der Transportgleichung die Integration auf die "echten" Zustände beschränken (also auf $E-A$), weil K für $x_1 \in E-A$ und $x_2 \in A$ den Wert Null hat (ebenso der Quellenterm $S(x)$ für $x \in A$).

Für die endlichdimensionalen Dichten setzen wir nun (wie schon in (3.1.16) erwähnt):

$$f(x_1, x_2, \dots, x_k) = f_1(x_1) \cdot \prod_{j=1}^{k-1} f_{2/1}(x_j \rightarrow x_{j+1}) \quad (3.3.48)$$

Daß diese Dichten durch Integration eine projektive Familie endlichdimensionaler VFn bilden, folgt unmittelbar aus ihrer Definition. Unter den im Anhang A.0 erläuterten topologischen Voraussetzungen, die für den Anwendungsfall nicht wirklich eine Einschränkung bedeuten, ist damit also ein stochastischer Prozeß (insbesondere ein W -Maß p auf der Menge aller Ketten $\omega \in (x_1, x_2, \dots)$) definiert. (Das hier im Unterschied zur zitierten Literatur angeführte topologische Argument erspart sowohl die aufwendigen und unnützen expliziten Konstruktionen der σ -Algebren, wie

auch die rechnerischen Nachweise, daß hinsichtlich dieser σ -Algebren mit $f_{1/2}$ sogenannte "verallgemeinerte Bairesche Funktionen" (/3.17/, Anhang und /3.8/) vorliegen).

Sei noch $\omega=(x_1, \dots, x_k, x_{k+1}, \dots)$ eine Kette und x_{k+1} das erste Glied mit $x_{k+1} \in A$ (was damit auch für alle nachfolgenden gilt), dann heißt die durch

$$k = l(\omega) = l(x_1, \dots, x_k, \dots) \quad (3.3.49)$$

definierte Funktion "Länge der Kette ω ".

Mit Hilfe der Dichten (3.3.48) lassen sich einzelne Wahrscheinlichkeiten berechnen, aber auch Schätzfunktionen hinsichtlich des Masses p integrieren. Ist z.B. A_k die Menge aller Ketten der Länge k , also $p(A_k)$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß eine Kette diese Länge hat, dann ergibt sich aus (3.3.48):

$$p(A_k) = \int dx_1 \dots dx_k S^*(x_1) \cdot \prod_{j=1}^{k-1} K(x_j, x_{j+1}) \cdot p_{sc}(x_j) / c(x_j) \cdot p_a(x_k) \quad (3.3.50)$$

Vergleicht man den in Kapitel 3.3.1 definierten Kaskadenprozeß mit dem durch (3.3.48) gegebenen, so unterscheidet sich letzterer von diesem zunächst durch die Indexmenge, die nun diskret ist, darüberhinaus sind die Historien nun auch nicht mehr verzweigt, was eine ganz wesentliche Erleichterung des Simulationsvorganges darstellt.

Es handelt sich um eine homogene Markov'sche Kette mit kontinuierlichem Zustandsraum.

Der auf diese Weise (über die "Vorwärts-Integralgleichung" als Zwischenschritt) aus dem ursprünglichen Kaskadenprozeß entstandene Prozeß wird als **analoger Prozeß** bezeichnet und das auf Realisierung der Pfade dieses Prozesses beruhende Verfahren als "analoges Monte-Carlo-Verfahren". (Dies beinhaltet auch die Verwendung der oben erwähnten aus dem physikalischen Modell übernommenen Abbruchwahrscheinlichkeit.)

Ist $\psi(x)$ die Lösung der IGL (3.3.45), dann liefert das in dieser Arbeit eingesetzte Monte-Carlo-Verfahren Abschätzungen für das Funktional $I=I_g$ mit:

$$I_g(\psi) = \int dx g(x) \cdot \psi(x) \tag{3.3.51}$$

Die Funktion g ist durch die jeweilige zu berechnende Größe definiert und nur der Einschränkung unterworfen, daß die Neumann'sche Reihe der IGL (3.3.45) nach Multiplikation mit g und anschließender Integration über E immer noch konvergiert. Sie kann insb. δ -Funktionen enthalten (für Punktschätzungen oder Schätzungen von Oberflächenintegralen), oder, wenn man an Profilen interessiert ist, auch charakteristische Funktionen für die einzelnen Zellen, mit denen der Ortsraum in diesem Fall diskretisiert ist, so daß das Integral dann de facto nur noch über die jeweilige Zelle erstreckt ist.

Nach dem in Kapitel 3.1.4 Gesagten muß zur Schätzung von I eine ZV X auf der Menge der Pfade Ω angegeben werden, mit der Eigenschaft:

$$I = E(x) = \int_{\Omega} dp X(\omega) \tag{3.3.52}$$

$E(X)$ kann nach (3.1.11) auch zunächst nur auf Mengen der Form A_k berechnet werden, dann erhält man $E(X)$ als Erwartungswert dieser geglätteten ZV, also:

$$E(X) = \sum_{k=1}^{\infty} p(A_k) \cdot E(X | 1(\omega)=k) \tag{3.3.53}$$

Der folgende Satz garantiert die Erwartungstreue der Schätzungen unter funktionanalytischen Voraussetzungen, die in unserem Anwendungsfall allerdings keine Einschränkung bedeuten (siehe Kapitel 3.3.4).

Satz 3.3.1 Sei X die für Ketten $\omega \in \Omega$ der Länge k wie folgt definiert Zufallsvariable auf Ω :

$$X(\omega) = \sum_{i=1}^k g(x_i) \cdot \prod_{j=1}^{i-1} c(x_j) / p_{sc}(x_j) \tag{3.3.54}$$

Zweitens sei g durch den Kern der IGL (3.3.45) definierte

Integraloperator auf $L_1(E)$ beschränkt und subkritisch. Der mit K bezeichnete Operator ordnet also jedem $u \in L_1(E)$ die Funktion $v(x) = \int dx' K(x' \rightarrow x) u(x')$ zu, $v \in L_1(E)$. Drittens sei die Abbruchwahrscheinlichkeit $p_a(x)$ so gewählt, daß es ein N und ein M gibt mit:

$$\prod_{i=1}^n p_{sc}(x_i)/c(x_i) \leq M \quad \text{für alle } n \geq N$$

Dann gilt hinsichtlich des durch den stochastischen Prozeß definierten Maßes p :

$$E(X) = I$$

m.a.W. X ist dann eine erwartungstreue Schätzfunktion für I .

Daß K subkritisch ist, heißt, daß das Spektrum von K , also die Menge aller λ , für die $K - \lambda \cdot I$ kein beschränktes Inverses besitzt, innerhalb des offenen Einheitskreises liegt. Insbesondere ist also $(K - I)^{-1}$ beschränkt (I ist der Einheitsoperator). Die gegen die dann eindeutige Lösung von (3.3.45) konvergierende Neumann'sche Reihe ist gerade die "resolvente Reihe".

Die dritte Voraussetzung schließt unendlich lange Ketten (fast sicher) aus.

Die Behauptung kann man nun wie folgt nachrechnen:

Einsetzen von (3.3.50) und (3.3.54) in (3.3.53) sowie

$$E(X | l(\omega) = k) = 1/p(A_k) \cdot \int \dots \int dx_1 \dots dx_k X(x_1, \dots, x_k) \cdot f(x_1 \dots x_k) \quad (3.3.56)$$

(integriert wird über alle Ketten der Länge k) liefert nach Vertauschen der beiden Summationen über k und i (dann beide bis Unendlich) und nach Kürzen der im Zähler und Nenner gleichermaßen auftretenden Ausdrücke $p(A_k)$, $c(x_j)$ und $p_{sc}(x_j)$ sowie einigen Umstellungen:

$$E(X) = \sum_{i=1}^{\infty} \int \dots \int dx_1 \dots dx_i S^*(x_1) \prod_{j=1}^{i-1} K(x_j \rightarrow x_{j+1}) \cdot g(x_i) \cdot N_{i>k} \quad (3.3.57)$$

Dabei ist mit $N_{i>k}$ die unendliche Reihe gegeben:

$$N_{i>k} = p_a(x_i) + \int dx_{i+1} p_a(x_{i+1}) K(x_i \rightarrow x_{i+1}) p_{sc}(x_i) / c(x_i) + \\ + \iint dx_{i+1} dx_{i+2} \prod_{j=i}^{i+1} K(x_j \rightarrow x_{j+1}) p_{sc}(x_j) / c(x_j) \cdot p_a(x_{i+2}) + \iiint \dots + \quad (3.3.58)$$

Für solche x_i mit $p_{sc}(x_i) = 0$ folgt sofort $N_{i>k} = 1$. Das Gleiche ergibt sich aber auch im Fall $p_{sc}(x_i) \neq 0$, denn den Faktor $p_{sc}(x_i)$ kann man dann aus jedem Summanden ausklammern, ferner überall $p_a(x)$ durch $1 - p_{sc}(x)$ ersetzen, dann erhält man:

$$N_{i>k} = p_a(x_i) + p_{sc}(x_i) - 1 / p_{sc}(x_i) \cdot \lim_{k \rightarrow \infty} \int dx_{i+1} \dots dx_k p_{sc}(x_k) \times \\ \times \prod_{j=i}^{k-1} K(x_j \rightarrow x_{j+1}) \cdot p_{sc}(x_j) / c(x_j) \quad (3.3.59)$$

Innerhalb des Grenzwertes steht die Wahrscheinlichkeit, daß eine Kette, die den Zustand x_i durchläuft, zumindest in den nächsten bis einschließlich dem k -ten nicht abbricht (wegen (3.3.50)). Da die Voraussetzungen zwei und drei unendlich lange Ketten fast sicher ausschließen (loc.cit. und /3.35/), hat der Limes den Wert Null, also wieder: $N_{i>k} = 1$.

Dies, in (3.3.57) eingesetzt, ergibt wegen der Konvergenz der Neumann'schen Reihe die Behauptung $E(X) = I = \int dx g(x) \psi(x)$!

Die somit als "erwartungstreu für den Parameter I der Wahrscheinlichkeitsverteilung p auf der Menge aller Pfade" nachgewiesene Schätzfunktion X liefert bei jedem Stoßereignis x_i , $i=1,2,\dots,k$ einer Kette der Länge k einen Beitrag zum Ergebnis. Betrachtet man anstatt X die Funktion X_a :

$$X_a(x_1, \dots, x_k) = g(x_k) / p_a(x_k) \prod_{j=1}^{k-1} c(x_j) / p_{sc}(x_j) \quad (3.3.60)$$

so verkürzt sich die obige Argumentation (die Reihe $N_{i>k}$ tritt gar nicht erst auf), diese Funktion ist also ebenfalls erwartungstreu. Sie liefert aber, abgesehen von den durch eventuelle Teilchenmultiplikation (nach (3.3.36)) verursachten Korrekturfaktoren c/p_{sc} , nur beim zur Absorption führenden Ereignis x_k einen Beitrag zur Schätzung.

3.3.4 ANWENDUNG AUF NEUTRALGASTRANSPORT

Dem o.a. Algorithmus folgend wurde ein recht allgemeiner Neutralgasttransportcode entwickelt, der außer am IPP der KFA-Jülich auch am Max-Planck-Institut für Plasmaphysik in Garching (in einer etwas älteren Version vom Sommer 1981) installiert ist und der später auch für JET (Culham) eingesetzt werden soll. Er kann einerseits zur Unterstützung der Diagnostik an Tokamaks, also als Interpretationscode, eingesetzt werden (/3.26/), andererseits auch im Rahmen des auf die Plasma-Wandwechselwirkung konzentrierten Programms in Jülich diverse Limiter- und Divertortypen in ihrer Auswirkung auf den Neutralgasttransport hin untersuchen (/3.27/,/3.28/). Dabei haben wir uns zu Gunsten größerer geometrischer Flexibilität auf den zeitunabhängigen Fall beschränkt. Nach den drei vorausgehenden Abschnitten ist diese Beschränkung nicht durch den Monte-Carlo-Algorithmus bedingt. Sie ist vielmehr den physikalischen Gegebenheiten angepaßt. Die Relaxationszeit für die Neutralgaskomponente ist um Größenordnungen kleiner als die für Plasmaänderungen charakteristische Zeit.

Letztere liegt bei Tokamaksimulationen im msec-Bereich. Ein neutrales H-Atom hat schon bei einer Energie von 3.5 (eV), mit der es etwa aus einem Dissoziationsprozeß hervorgeht, eine Geschwindigkeit von ca. $5 \cdot 10^6$ (cm/sec), bei einer charakteristischen Abmessung eines Laborplasmas von 10^2 (cm). Zeitabhängige Lösungen sind für stark vereinfachende Modelle in /3.22/ angegeben und ergeben tatsächlich durchweg Relaxationszeiten im 10-100 μ -sec.-Bereich. Neutrale Moleküle, die mit Wandtemperatur von ca. 0.01 (eV) ins Plasma starten, sind zwar um 2-3 Größenordnungen langsamer, werden aber (siehe Kapitel 4.1) wegen ihrer sehr großen Stoßraten schon praktisch alle in der Randschicht dissoziiert.

Wegen dieses Umstandes nehmen wir im weiteren an, daß weder die Quellenverteilung Q noch die Stoßparameter und damit der Integralkern K in der Transportgleichung eine explizite Zeitabhängigkeit besitzen, und daß ferner auch nur eine stationäre Lösung $\psi(i, r, v)$ der IGL (3.3.40) über die Ausdrücke (3.3.51) in die Ergebnisse eingeht. Der in den Ausdrücken für $S(x)$ und für den Transportkern T auftretende Parameter t ist dann eine

reine Integrationsvariable und kann mit der Substitution $s=t \cdot |\mathbf{v}|$ auch formal beseitigt werden.

Die hierdurch auftretenden Faktoren $|\mathbf{v}|$ fassen wir noch mit ψ zusammen, also:

$$\phi(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = |\mathbf{v}| \cdot \psi(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) \quad (3.3.61)$$

(Bez.: (Transport-) Fluß, obwohl ϕ von der Dimension her eigentlich eine Flußdichte ist.)

Anstelle der "optischen Dicken" $\alpha(x)$ treten nun (gem. Kapitel 3.3.1) die (makroskopischen) "Querschnitte" $\Sigma(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = \alpha(i, \mathbf{r}, \mathbf{v})/|\mathbf{v}|$ in den Integralen im Exponenten der Exponentialfunktionen auf. In den zitierten Abhandlungen zur Neutronentransporttheorie wird anstelle des Flusses ϕ als gesuchte Funktion die durch

$$\zeta(x) = \phi(x) \cdot \Sigma_{\text{tot}}(x) \quad (3.3.62)$$

definierte "Stoßdichte" verwendet. Dies ist für hier interessierende Fragen, wo auch im Falle $\Sigma_{\text{tot}} = 0$ (z.B. in den weiten Teilen von Divertorkammern, in denen kein Plasma vorhanden ist oder in den Pumpstützen von Pumplimitern) effektive erwartungstreue Schätzungen erhalten werden sollen, nicht angebracht. Insgesamt heißt das: der entwickelte Monte-Carlo-Code liefert Schätzungen für Größen der Form $I = \int dx g(x)\phi(x)$, wenn $\phi(x)$ eine Lösung der aus dem physikalischen Modell (dem Kaskadenprozeß) abgeleiteten IGL (3.3.40) ist, die nun lautet:

$$\begin{aligned} \phi(x) &= S(x) + \int dx' K(x' \rightarrow x) \cdot \phi(x') \\ S(x) &= \int dx' Q(x') F(x' \rightarrow x) \end{aligned} \quad (3.3.63)$$

wobei wir für die Integralkerne die Bezeichnungen trotz der Substitution $s=|\mathbf{v}| \cdot t$ beibehalten haben, d.h. jetzt:

$$K(x' \rightarrow x) = C(r', u' \rightarrow u) \cdot \Sigma_{\text{tot}}(r', u') / \Sigma_{\text{tot}}(r, u) \cdot T(r', u \rightarrow r) \quad (3.3.64)$$

Die Kerne $F(x' \rightarrow x)$ bzw. $T(x' \rightarrow x) = \Sigma_{\text{tot}}(x) \cdot F(x' \rightarrow x)$ mögen dabei zur weiteren Straffung die in (3.3.41) und (3.3.42b) angeführten δ -Funktionen bereits enthalten.

Der inhomogene Term $S(x)$ der IGL ist nicht die Verteilungsdichte der Quelle selbst, sondern die mit der Funktion F (die der "Green'schen Funktion" des kinetischen Teiles der linearen Boltzmann-Gleichung in integrodifferentialer Form entspricht - z.B. /3.25/, /3.7/) transformierte. Es ist aber insbesondere aus Gründen der physikalischen Anschaulichkeit und der Transparenz des Computercodes wünschenswert, die tatsächlich im physikalischen Modell auftretende Quellenverteilung Q als Startverteilung für die Ketten realisieren zu können.

Also setzen wir noch:

$$\phi(x) = \int dx' F(x' \rightarrow x) \cdot \chi(x') \quad (3.3.65)$$

in die IGL (3.3.63) ein, lassen den auf beiden Seiten stehenden Ausdruck $\int dx' F(x' \rightarrow x) \dots$ wieder weg und erhalten die IGL:

$$\chi(x) = Q(x) + \int dx' T(r', u' \rightarrow r) \cdot C(r, u' \rightarrow u) \cdot \chi(r', u') \quad (3.3.66)$$

Diese IGL ist die Basis für den gem. Kap. 3.3.3 konstruierten und im Rechner nachgebildeten stochastischen Prozeß.

Die Lösung χ stellt physikalisch die pro Zeiteinheit im Zustand x durch Stöße oder direkt durch die Quelle bewirkte Änderung der Teilchendichte dar.

Die Funktion $g(x)$ im Integral $I = \int dx g(x) \phi(x)$ hat durch den Übergang von (3.3.63) zu (3.3.65) eine andere Bedeutung in der erwartungstreuen Schätzfunktion X (nach (3.3.54) bzw. X_a nach (3.3.60)). Es ist nämlich:

$$I = \int dx g(x) \phi(x) = \int dx' \chi(x') \int dx F(x' \rightarrow x) \cdot g(x) = \int dx g_F(x) \chi(x) \quad (3.3.67)$$

und deshalb ist nun die Schätzfunktion (für $(x_1, \dots, x_k, \dots) \in A_k$)

$$X_{\text{con}}(x_1, \dots, x_k) = \sum_{i=1}^k g_F(x_i) \prod_{j=1}^{i-1} c(x_j) / p_{\text{sc}}(x_j) \quad (3.3.68)$$

mit

$$g_F(x) = \int_0^{s_{\text{max}}} ds g(r+sV/|V|, V, i) \exp(-\int_0^s ds' \Sigma_{\text{tot}}(r+s'V/|V|, V, i))$$

(bzw. auch $X_{\text{con},a}$ mit g_F anstatt g) eine erwartungstreue Schätzfunktion für die Größe I in (3.3.67).

Die obere Integrationsgrenze s_{max} bedeutet die Länge des Weges, der bis zum Erreichen des Randes zurückzulegen ist.

Auf Grund des in g_F auftretenden Wegintegrals liefert diese Schätzfunktion (anders als offenbar alle bislang in Neutralgascodes eingesetzte Funktionen) einen Beitrag für Schätzungen in Gebieten, die in Flugrichtung des Testteilchens liegen, auch wenn dort während des Monte-Carlo-Experimentes kein einziges Teilchen hingelangt ist. Anders ausgedrückt:

Es wird nicht nur über Ereignisse gemittelt, die während der Simulation eintreten, sondern in gewissen Umfang noch über solche, die hätten eintreten können.

Bevor noch etwas zu den Voraussetzungen im Satz 3.3.1 gesagt wird, sollen erst noch die beiden weiteren Schätzfunktionen, die im entwickelten Rechencode neben X_{con} als weitere Optionen erhalten sind, beschrieben werden.

Der aus der IGL (3.3.66) abgeleitete stochastische Prozeß sei $(\Omega, \mathbb{V}, p, (Y_l, l=1, 2, \dots))$.

Die Erwartungswertbildung ist mit Summationen vertauschbar, also:

$$E(X_{\text{con}}) = E\left(\sum_{i=1} X_{\text{con},i}\right) = \sum_{i=1} E(X_{\text{con},i}) \quad (3.3.69a)$$

mit

$$X_{\text{con},i}(x_1, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots) = g_F(x_i) \prod_{j=1}^{i-1} c(x_j) / p_{\text{sc}}(x_j) \quad (3.3.69b)$$

Dabei haben wir uns auf Ketten einer festen Länge k beschränkt, was wegen (3.3.53) möglich ist.

Anstelle der ZV X_{con} und auch $X_{\text{con},i}$ können alle anderen ZV als Schätzfunktion für I verwendet werden, die den gleichen Erwartungswert haben. Die ZV $X_{\text{con},i}$ hängt nur von den Werten ab, die die ersten i unter den Zufallsvariablen Y_1 aus der Familie von ZV des stochastischen Prozesses annehmen. In wahrscheinlichkeitstheoretischer Sprache heißt das (Kap. 3.1.1 und 3.1.2): $X_{\text{con},i}$ ist messbar hinsichtlich der größten σ -Unteralgebra \mathcal{V}_i , hinsichtlich der diese Y_1, \dots, Y_i auch messbar sind. Andere ZV X_i erhält man nach (3.1.10), (3.1.11) also insbesondere, indem man $X_{\text{con},i}$ weiter glättet, also:

$$X_i = E(X_{\text{con},i} | \mathcal{V}_i^+), \text{ mit } \mathcal{V}_i^+ \subset \mathcal{V}_i \quad (3.3.70a)$$

oder selbst als Glättung einer ZV X_i auffaßt, dann:

$$X_{\text{con},i} = E(X_i | \mathcal{V}_i), \text{ mit } \mathcal{V}_i^+ \supset \mathcal{V}_i \quad (3.3.70b)$$

(Das Gleiche gilt natürlich auch ohne den Index i .)

Die Bildung des bedingten Erwartungswertes ist ein Integrationsprozeß, man kann also sagen: (3.3.70a) reduziert die statistische Varianz pro Stoßereignis, man muß aber bei jedem Stoß mehr Rechenzeit für die Auswertung der Schätzfunktion aufwenden. Bei (3.3.70b) sind die Verhältnisse genau umgekehrt.

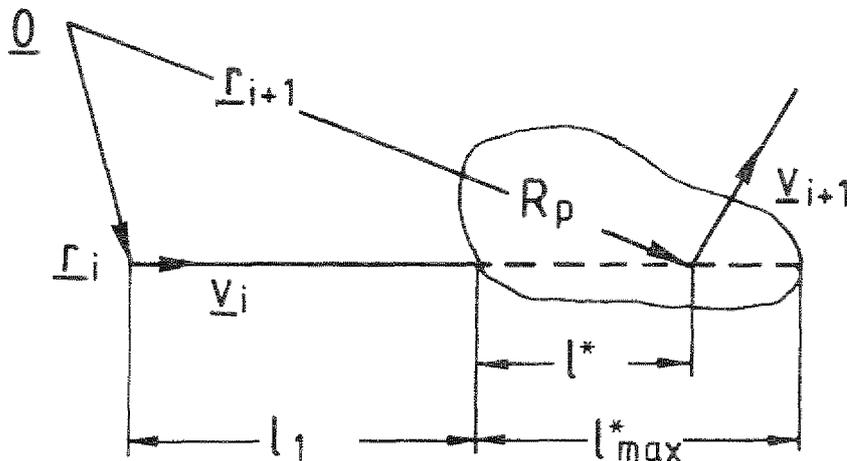
Das Konzept der bedingten Erwartungswerte ermöglicht es zumindest prinzipiell, das Verhältnis von Statistik zu analytischem Vorgehen zugunsten der einen oder anderen Seite zu verschieben. Im Grenzfall: Glättung von X_{con} hinsichtlich der kleinsten σ -Algebra $\{\emptyset, \Omega\}$, ist aus dem Monte-Carlo-Algorithmus ein analytisches Verfahren geworden.

Um in unserem Fall die Integration in X_{con} (lt. (3.3.68)) vermeiden zu können, soll auf $X_{\text{con},i}$ eine Konstruktion des Typs (3.3.70b) (Bez. "Randomisieren der ZV $X_{\text{con},i}$ ", entlehnt einer in der statistische Testtheorie in vergleichbarer Situation verwendeten Terminologie, /3.31/), durchgeführt werden.

Dazu setzen wir: R_p sei das Teilvolumen von R , für das $g(x)$ nicht verschwindet, also etwa bei einer Diskretisierung des Ortsraumes diejenige Zelle, für die die ZV X_{con} den Wert der Größe I schätzen soll. Dann wählen wir als Schätzfunktion X_i :

$$X_i(x_1, \dots, x_i, l^*) = \prod_{j=1}^{i-1} c(x_j) / p_{sc}(x_j) \cdot \int_0^{l^*} dl g(r_i + l v_i / |v_i|, v_i, i_i) \quad (3.3.71)$$

die nun also außer von x_1, \dots, x_i noch von dem Wert l^* einer weiteren ZV L^* abhängt. L^* soll dabei die in R_p zurückgelegte Weglänge messen, wenn vom Zustand x_i ausgehend nochmal der Transportkern $T(x_i \rightarrow x_{i+1})$ realisiert wird. (Skizze 3.4.1)



l_{max}^* sei dabei die maximal mögliche Länge. Daß X_i und $X_{\text{con},i}$ den gleichen Erwartungswert haben, rechnet man gem. (3.3.70b) nach, indem man X_i hinsichtlich v_i glättet, d.h. X_i mit der bedingten VD von l^* bei gegebenem x_1, \dots, x_i multipliziert und über alle möglichen Werte l^* integriert. Dabei nehmen wir an, daß R_p in Flugrichtung v_i von r_i liegt, andernfalls liefern X_i und $X_{\text{con},i}$ übereinstimmend den Beitrag Null. Ferner werde R_p auch nur einmal von der Flugbahn geschnitten, andernfalls müssen die einzelnen Beiträge noch aufsummiert werden.

Wir kürzen ab: $\Sigma_{\text{tot}}(l) = \Sigma_{\text{tot}}(r_i + l v_i / |v_i|, v_i, i_i)$, dann ist:

$$f(l^* | x_i) = \begin{cases} \{1 - \exp(-\int_0^{l^*} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl)\} \cdot \delta(l^*) & \text{für } l^* = 0 \\ \exp(-\int_0^{l^*} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) \cdot \Sigma_{\text{tot}}(l_1 + l^*) \cdot \exp(-\int_{l_1}^{l_1 + l^*} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) & \text{für } 0 < l^* < l_{\text{max}}^* \\ \exp(-\int_0^{l_1} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) \cdot \delta(l^* - l_{\text{max}}^*) \cdot \exp(-\int_{l_1}^{l_1 + l_{\text{max}}^*} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) & \text{für } l^* = l_{\text{max}}^* \end{cases}$$

(3.3.72)

die nur von x_i abhängende bedingte Dichte von l^* . l_1 ist dabei der Skizze 3.4.1 zu entnehmen, und $l_2 = l_1 + l_{\text{max}}^*$.

Das Produkt von $f(l^* | x_i)$ und X_i (aus (3.3.71)), integriert über l^* von Null bis l_{max}^* (partielle Integration), ergibt genau $X_{\text{con},i}$ und damit die Erwartungstreue der mit X_i definierten "Weglängenschätzfunktion". Führt man nämlich die Integration aus, dann liefert der erste Term in $f(l^* | x_i)$ ($l^* = 0$) keinen Beitrag wegen $X_i(x_1, \dots, x_i, 0) = 0$. Er steht in $f(l^* | x_i)$ zur Berücksichtigung des Falles, daß schon vor Erreichen von R_p ein Stoß stattfindet. Der zweite Term (Stoß in R_p) macht die partielle Integration nötig, er liefert zum Integral den Beitrag:

$$\begin{aligned} I_1 &= \exp(-\int_0^{l_1} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) \{ \{1 - \exp(-\int_{l_1}^{l_1 + l^*} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl)\} \cdot \int_{l_1}^{l_1 + l^*} g(l) dl - \\ &\quad - \int_{l_1}^{l_1 + l^*} g(l) \{1 - \exp(-\int_{l_1}^{l_1 + l^*} \Sigma_{\text{tot}}(l') dl')\} dl \} \\ &= \exp(-\int_0^{l_1} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) \{ -\exp(-\int_{l_1}^{l_1 + l^*} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) \cdot \int_{l_1}^{l_1 + l^*} g(l) dl \\ &\quad + \int_{l_1}^{l_1 + l^*} g(l) \cdot \exp(-\int_{l_1}^{l_1 + l^*} \Sigma_{\text{tot}}(l') dl') dl \} \end{aligned}$$

(3.3.73)

Der dritte Term in $f(l^* | x_i)$ (Durchfliegen von R_p ohne Stoß) ergibt im Integral den Beitrag:

$$I_2 = \exp(-\int_0^{l_1} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) \cdot \exp(-\int_{l_1}^{l_2} \Sigma_{\text{tot}}(l) dl) \cdot \int_{l_1}^{l_2} g(l) dl \quad (3.3.74)$$

Dabei wurde für die Argumente in der Funktion g die gleiche Abkürzung verwendet wie schon vorher in Σ_{tot} . Insgesamt ist

$$I_1 + I_2 = X_{\text{con}, i}, \text{ was nachzurechnen war.}$$

Ändert man X_i so zu $X_{i,c}$ ab, daß im Fall $l^* = l_{\text{max}}^*$ auch noch der Wert Null angenommen wird, und daß ferner sonst anstelle des Linienintegrals der Wert $g(r_{i+1}, u_i) / \Sigma_{\text{tot}}(r_{i+1}, u_i)$ tritt (also $r_{i+1} \in R_p$), dann entfällt die partielle Integration, und es ist $I_2 = 0$. Ohne Rechnung ergibt sich so die Erwartungstreue auch dieser Schätzfunktion $X_{i,c}$ (Bez.: "Stoßschätzfunktion").

Einige Spezialfälle der Schätzfunktionen X_i und $X_{i,c}$ werden in den verschiedenen Neutralgas-Transportcodes in der Fusionsforschung bereits verwendet.

Ist nämlich g konstant in R_p , dann reduziert sich (3.3.71) zu:

$$X_{i,1}(x_1, \dots, x_i, l^*) = \prod_{j=1}^{i-1} c(x_j) / p_{sc}(x_j) \cdot g(u_i) \cdot l^* \quad (3.3.75)$$

wobei wieder l^* die in R_p zurückgelegte Weglänge auf dem Flug von r_i nach r_{i+1} ist.

Soll nun z.B. die mittlere Dichte n_{R_p} von Neutralteilchen in R_p geschätzt werden, so ist also wegen (3.3.67)

$$g(r, v, i) = g(|v|) = 1/|v| \cdot Q/V_{R_p} \cdot \text{ch}_{R_p}(r) \quad (3.3.68)$$

zu setzen. Q ist nach (3.3.45) die Quellstärke (1/sec) und mit V_{R_p} sei das Volumen des Raumelementes R_p bezeichnet.

Entsprechend ergeben sich auch andere Momente des Flusses $\phi(r, v, i)$. Soll nur die Dichte einer Spezies i_0 geschätzt werden, dann muß g außer der

charakteristischen Funktion $ch_{R_p}(\mathbf{r})$ für die Zelle R_p auch noch ein Kroneckersymbol $\delta_{i_0,i}$ für den Speziesindex enthalten.

In /0.6/ und /0.7/ wird dieses Verfahren ebenfalls angewendet. Die kinetische Neutralgastemperatur wird als Quotient von kinetischem Druck und Teilchendichte erhalten, unter Vernachlässigung des durch Teilchendriften bewirkten Anteils. ($g(|\mathbf{v}|,i)=|\mathbf{v}| \cdot m/3 \cdot Q/V_{R_p} \cdot ch_{R_p}(\mathbf{r})$ für den Druck, m =Teilchenmasse)

Ebenfalls durch Mittelung über die Teilchendichte läßt sich z.B. die Diffusionsgeschwindigkeit oder der in Kapitel 3.1.4 angegebene Variabilitätskoeffizient für die Teilchendichte schätzen.

Der Normierungsfaktor $Q/V_{R_p} \cdot ch_{R_p}(\mathbf{r})$ sei N , ferner sei $\Sigma_k(x)$ der makroskopische Querschnitt für einen Stoßprozeß k . Mit $g(x)=N \cdot \Sigma_k(x)$ konvergiert das Verfahren dann gegen die Stoßdichte für diesen Prozeß ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{sec}^{-1}$). Auf diese Weise erhält man erwartungstreue Schätzungen der in die Transportgleichungen für das Plasma eingehenden Quellterme. Ist $\Delta E(x)$ der bei solch einem Stoß erlittene Energieverlust (-oder Gewinn), dann konvergiert das Verfahren mit $g(x) = N \cdot \Sigma_k(x) \cdot \Delta E(x)$ gegen den entsprechenden Quellterm für die Energiebilanzgleichung (z.B. in Watt/cm^3).

In den auf Divertorverhältnisse zugeschnittenen Codes /0.8/ und /3.38/-/3.40/ wird eine Modifikation der Schätzfunktion $X_{i,c}$ verwendet (siehe Anhang B). Diese hauptsächlich in der Neutronentransporttheorie verwendeten Verfahren sind nur für den Fall $\Sigma_{\text{tot}} \neq 0$ einsetzbar. Die in der Literatur im Hinblick auf dieses Anwendungsgebiet gegebenen Beweise der Erwartungstreue von Schätzfunktionen benutzen diese Voraussetzung (/3.4/,/3.7/,/3.33/ bis /3.37/) (sowie die Ortsunabhängigkeit von g und Σ_{tot} in R_p). Zum Beispiel wird in /3.4/ und /3.34/ die Erwartungstreue von $X_{i,1}$ durch einen Grenzübergang

$$\lim_{\Sigma_{\delta} \rightarrow \infty} \Sigma_{\text{tot}} / \Sigma_{\delta} \cdot X_{i,c}$$

aus derjenigen von $X_{i,c}$ abgeleitet.

Ansonsten wird der Fluß ϕ durch $1/\Sigma_{\text{tot}} \cdot \zeta$ eingeführt, und ζ ist die Lösung der IGL für die Stoßdichte (3.3.62), die in diesen Arbeiten zu Grunde ge-

legt ist. Dann wird gezeigt, daß $X_{i,c}$ mit $g=1/\Sigma_{\text{tot}}$ das Gleiche ergibt wie $X_{i,1}$ mit $g=1$. Um in den plasmafreien Gebieten innerhalb des Gefäßes diese Schätzfunktionen einsetzen zu können, mußten die Autoren des in /0.8/ beschriebenen Codes ein "Pseudoplasma" einführen, in dem "künstliche Stoßprozesse" ablaufen.

Dieser Zugang ist zwar korrekt, aber es werden durch das "Auswürfeln der Stoßsorte mit dem Pseudoplasma" zusätzliche statistische Fehler in das Verfahren eingebracht. Wir haben hier deshalb nicht X_i aus $X_{i,c}$ abgeleitet, sondern sowohl X_i als auch $X_{i,c}$ durch Randomisieren von $X_{\text{con},i}$ erhalten und nur für $X_{i,c}$ die Voraussetzung $\Sigma_{\text{tot}} \neq 0$ benötigt. Die Schätzfunktion X_i ist besonders adäquat in Gebieten mit großer freier Weglänge, umgekehrt hat $X_{i,c}$ in Gebieten großer Stoßfrequenz statistische Vorteile, beide positive Eigenschaften werden von $X_{\text{con},i}$ zu Lasten der Einfachheit bei der Auswertung vereinigt.

Mit zwei Bemerkungen soll dieser Unterabschnitt abgeschlossen werden:

3.3.4.1 Interpretation der IGL (3.3.66)

Bedingt durch die Transformation der IGL für den Fluß ϕ (3.3.63) auf eine IGL für die Größe x (3.3.66) hatte die Funktion g eine andere Bedeutung erhalten (3.3.68), an dem Vorgehen zur Berechnung der Ketten ändert sich aber nichts: Realisieren von Q , dann T, C, T, \dots bis Absorption eintritt. Die in der Schätzfunktion X oder X_a (3.3.54) bzw. (3.3.60) auftretenden Funktionen c , p_{sc} und p_a hatten vor der Transformation die physikalische Bedeutung: mittlere Teilchenzahl nach einem Stoß, Überlebenswahrscheinlichkeit und Absorptionswahrscheinlichkeit. Weil T auf Eins normiert war, sind sie ausschließlich aus den Bestimmungsstücken von C berechenbar, nämlich $p_{sc} = \Sigma_{sc} / \Sigma_{\text{tot}}$, $p_a = \Sigma_a / \Sigma_{\text{tot}}$ und c gemäß (3.3.35). Ihr Argument ist der Zustand jeweils vor Realisierung des Stoßkernes C .

Nach der Transformation mit der Green'schen Funktion aber hat sich die Reihenfolge der Kerne C und T im Kern der IGL geändert. Deshalb ist das

Argument dieser Funktionen nun der Zustand vor Ausführung des Transportkernes T , und sie sind ihrer Bedeutung nach jetzt Mittelungen der ursprünglichen Größen längs der durch die Geschwindigkeitskomponente ausgezeichneten Flugbahn bis zum Gefäßrand (also analog zu g_F , das so aus g hervorging (3.3.68)). Es ändert sich aber nichts an der Korrektheit des Verfahrens, wenn man an Stelle dieser Linienintegrale wieder die ursprünglichen Funktionen, ausgewertet mit dem Argument (r_{j+1}, v_j, i_j) des nächsten Stoßpunktes, verwendet. Auch dann kürzen sich nämlich die Faktoren c/p_{sc} in der Rechnung in Kap. 3.3.3 heraus, ebenfalls ist der Wert von $N_{i>k}$ wieder Eins (wegen der Normierung von T auf Eins hinsichtlich des zweiten Arguments).

3.3.4.2 Physikalische Interpretation der Konvergenzvoraussetzungen

Die im Satz 3.3.1 gemachten Voraussetzungen bedeuten für den hier vorgesehenen Anwendungsfall keine wirkliche Einschränkung.

Zunächst sind die Funktionen g hier höchstens dann nicht beschränkt, wenn sie δ -Distributionen enthalten, um etwa für Schätzungen von Teilchen- oder Energieflüssen auf eine Wand die Volumenintegration im Ortsraum in $I = \int dx g(x)\phi(x)$ formal auf ein Oberflächenintegral zu reduzieren. Dies ändert nichts an der Gültigkeit des Satzes.

Die Beschränktheit des Integraloperators folgt z.B. aus

$$\sup_{x \in E} \int dx' K(x \rightarrow x') = \sup_{x \in E} c(x) = M,$$

also aus der Tatsache, daß die mittlere Teilchenzahl der aus einem Stoßereignis hervorgehenden Sekundärteilchen bei unserem aus einem physikalischen Modell abgeleiteten Prozeß immer endlich ist.

K subkritisch bedeutet für den zugrundeliegenden physikalischen Prozeß genügend starke Absorptionsmechanismen.

Im Fall der Anwendung auf Neutralgastransport sind aber auf Grund der starken Verlustmechanismen (Ionisation und Wandprozesse) die auftretenden Zufallswege meist so kurz, daß man aus statistischen Gründen sogar in den Neutralgascodes die Lebensdauer der Testteilchen künstlich erhöht und diese "Schiefe in der Schätzung" durch Anpassung der Schätzfunktion (Einführung statistischer Gewichte) wieder korregieren muß. Solche Möglichkeiten sollen im nachfolgenden Abschnitt beschrieben werden.

Die dritte Voraussetzung ist im analogen Monte-Carlo-Verfahren immer erfüllt, wegen $p_{sc}(x) \leq c(x)$. Wählt man aber die Abbruchwahrscheinlichkeit anders als durch das physikalische Modell bestimmt, z.B. nach ökonomischen Gesichtspunkten, so gilt diese Ungleichung nicht mehr automatisch.

Für $p(A_\infty) = 0$ ist dann diese schon in Kapitel 3.3.3 erwähnte zusätzliche Voraussetzung hinreichend.

3.4 NICHTANALOGES MONTE-CARLO-VERFAHREN

Bisher ist erläutert worden, wie man durch Auswahl einer geeigneten Schätzfunktion den statistischen Fehler eines Monte-Carlo-Codes günstig beeinflussen kann. Nun soll noch gezeigt werden, wie dies auch durch Übergang zu einem anderen als dem analogen Prozeß, dessen Pfade dann realisiert werden, möglich ist. Dabei wird zunächst kurz der allgemeine theoretische Hintergrund zitiert, der der gleiche ist wie auch bei Anwendungen in der Neutronentransporttheorie. Dann werden im nächsten Abschnitt die im hier beschriebenen Rechencode in dieser Hinsicht verfügbaren Optionen beschrieben.

Der in Kapitel 3.3 konstruierte stochastische Prozeß ist in dem Sinne analog, daß die im physikalischen Modell (dem Kaskadenprozeß von Kap. 3.3.1) angenommenen Start-, Übergangs- und Abbruchwahrscheinlichkeiten über die Kerne C und T sowie über die Verteilungsdichte Q und die Funktionen p_{sc} , p_a und c auch im mathematischen Modell verwendet werden, um das W-Maß p auf der Menge der Trajektorien zu erhalten. Irgendeine andere

Startverteilungsdichte Q^* , ein anderer Kern K^* und andere Funktionen p_{sc}^* , p_a^* und c^* hätten auch eine andere Wahrscheinlichkeitsverteilung p auf der Menge der Pfade zur Folge.

Der Erwartungswert, gegen den das Verfahren konvergiert, ist bei Verwendung einer Schätzfunktion X das Integral $I = \int dp X$. Unter gewissen Voraussetzungen besitzt nun p eine sogenannte "Radon-Nikodym'sche Dichte" dp/dp^* hinsichtlich p^* , sodaß gilt:

$$I = \int dp X = \int dp^* (dp/dp^*) \cdot X = \int dp^* X^*, \text{ mit } X^* = X \cdot (dp/dp^*) \quad (3.4.1)$$

Bei Verwendung dieser transformierten Schätzfunktion X^* erhält man also auch mit dem anderen Prozeß genau die gleichen Resultate. In /3.35/, /3.37/, /3.42/ und zusammengefaßt in /3.3/, /3.4/ und /3.10/ sind solche Fragen untersucht, und es ergibt sich der folgende allgemeine

Satz 3.4.1 (Satz 2 in /3.35/)

Es seien wie oben Q , K , p_{sc} , p_a und c die Bestimmungsstücke des analogen Prozesses, ferner seien Q^* , K^* , p_{sc}^* , p_a^* und c^* Funktionen, die auf die gleiche Weise einen zweiten "nichtanalogen" Prozeß definieren, mit den zusätzlichen Bedingungen:

$$\begin{aligned} Q^*(x) = 0 &\Rightarrow Q(x) = 0 \\ K^*(x_1 \rightarrow x_2)/c^*(x_1) = 0 &\Rightarrow K(x_1 \rightarrow x_2)/c(x_1) = 0 \\ p_a^*(x) = 0 &\Rightarrow p_a(x) = 0 \\ p_{sc}^*(x) = 0 &\Rightarrow p_{sc}(x) = 0 \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

Wenn dann die für Ketten jeder Länge k definierte Funktion

$$\begin{aligned} W(x_1, \dots, x_k) = Q(x_1)/Q^*(x_1) \cdot \prod_{j=1}^{k-1} K(x_j \rightarrow x_{j+1})/K^*(x_j \rightarrow x_{j+1}) \times \\ \times p_{sc}(x_j)/p_{sc}^*(x_j) \cdot c^*(x_j)/c(x_j) \cdot p_a(x_k)/p_a^*(x_k) \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

(fast sicher) beschränkt ist, existiert die Radon-Nikodym'sche Dichte dp/dp^* und W ist eine der (nur fast eindeutig bestimmten) Versionen dieser Dichte.

Erfüllt außerdem der nichtanalogue Prozeß die gleichen zur Konvergenz nötigen Kriterien (Konvergenz der Neumann'schen Reihe, $p^*(A_\infty) = 0$), wie sie

für den analogen Prozeß im Satz 3.3.1 in Kapitel 3.3.3 gefordert waren, dann ist nach (3.4.1) mit X^* eine erwartungstreue Schätzfunktion für den Parameter I des nichtanalogen Prozesses gegeben. (Nur in dieser etwas unpräzisen Form werden in der Praxis bei Entwicklung eines Neutralgascodes die zur Konvergenz notwendigen Voraussetzungen berücksichtigt: Erhöht man nämlich zum Beispiel die Überlebenswahrscheinlichkeit p_{sc}^* oder die mittlere aus einem Stoß hervorgehende Teilchenzahl c^* stark über die analogen Werte p_{sc} und c , dann sorgt man gleichzeitig durch Erhöhung der Abbruchwahrscheinlichkeit p_a in anderen Gebieten des Zustandsraumes für ausreichend starke Absorptionsmechanismen. Die für die Kernreaktorphysik wichtigen genauen Formulierungen der subkritischen Verhalten auch des nichtanalogen Systems garantierenden Bedingungen sind der oben zitierten Literatur zu entnehmen.

Daß X^* erwartungstreu für I ist, kann man exakt genauso wie beim Beweis von Satz 3.3.1 nachrechnen. Die Funktion W ist nämlich gerade so definiert, daß sich alle Terme des nichtanalogen Prozesses im Produkt von Schätzfunktion X^* und nichtanaloger Verteilungsdichte $f^*(x_1, \dots, x_k)$ genau herauskürzen, sodaß man sofort (3.3.57) erhält (Satz 3.6 und Satz 3.7 in /3.4/). Die Funktion W bedeutet anschaulich die Gewichtskorrektur $f_{\text{analog}}/f_{\text{nichtanalog}}^*$, die immer dann angebracht werden muß, wenn irgendwo während des Simulationsvorganges anstatt einer analogen, aus dem physikalischen Modell abgeleiteten Verteilungsdichte f_{analog} eine aus praktischen und ökonomischen Gründen andere Dichte $f_{\text{nichtanalog}}^*$ realisiert wurde.

Aus praktischen Gründen benutzen wir allerdings im Rechencode nicht die Schätzfunktion X^* , sondern eine ebenfalls erwartungstreue leicht abgewandelte.

Dazu sei $W_{k,i}(x_1, \dots, x_k)$ der Teil von $W(x_1, \dots, x_k)$ aus (3.4.3), der nur von den ersten i Punkten einer Kette der Länge k abhängende Faktoren enthält, im Falle $i=k$ darüberhinaus auch nicht den Faktor $p_a(x_k)/p_a^*(x_k)$.

Ferner sei Y eine der Schätzfunktionen X_{con} , X , X_c aus Kapitel 3.3.4 mit $Y = \sum_i Y_i$, Y_i gleich $X_{\text{con},i}$, X_i oder $X_{c,i}$, dann gilt:

Satz 3.4.2 Die Schätzfunktion $Y^* = \sum_{i=1}^k W_{k,i} * Y_i$ hat hinsichtlich des nichtanalogen Masses p^* den gleichen Erwartungswert wie Y hinsichtlich des analogen Masses p . (k ist die Länge der Kette, die das Argument der Schätzfunktion ist.)

Der einzige Unterschied beim Beweis gegenüber dem für die Erwartungstreue von X^* ist die Tatsache, daß sich beim Einsetzen von Y^* und der nichtanalogen Verteilungsdichte f^* in 3.3.56 nicht sofort die Gleichung (3.3.57) ergibt, sondern eine entsprechende Gleichung, in der lediglich anstatt der unendlichen Reihe $N_{i>k}$ nun die Reihe $N_{i>k}^*$ auftritt, in der alle Funktionen durch die entsprechenden nichtanalogen ersetzt sind. Auch der Wert von $N_{i>k}^*$ ist Eins, wenn, was vorausgesetzt war, auch der nichtanaloge Prozeß subkritisch ist. Dies bedeutet die behauptete Gleichheit der Erwartungswerte.

Die Schätzfunktion Y^* ist deshalb günstiger, weil sie im Unterschied zu X^* gleichzeitig mit der Berechnung der Historien ausgewertet werden kann, die Ketten müssen also nicht erst abgespeichert werden.

3.5 SPEZIELLE NICHTANALOGUE VERTEILUNGEN

Nach dem im vorigen Abschnitt Gesagten muß eine Verteilung im Rechencode nicht schon deshalb realisiert werden, weil sie im physikalischen Modell auftritt. Allerdings sollte aber die an deren Stelle verwendete nichtanaloge Verteilung der ursprünglichen möglichst ähnlich sein, um zu große Schwankungen in den statistischen Gewichten $W(x_1, \dots, x_k)$ zu vermeiden. Daß andererseits die tatsächlich verwendeten Dichten möglichst einfach realisierbar sein sollen, ist oft eine gegenläufige Forderung, zwischen beiden muß dann ein Kompromiß gefunden werden.

3.5.1 ABRUCHWAHRSCHEINLICHKEIT

In den meisten Neutralgascodes (/0.5/ bis /0.8/) wird bei einem während der Berechnung einer Trajektorie auftretenden Absorptionsereignis (Ionisation oder Wandprozeß) nur das statistische Gewicht des Teilchens um den Faktor Σ_{sc}/Σ_{tot} erniedrigt, so lange, bis das Gewicht kleiner als eine Konstante W_{min} geworden ist. (meist $W_{min} = 10^{-5}$ oder 10^{-6}), um so die Lebensdauer des Testteilchens zu erhöhen. Es sei erwähnt, daß hierdurch die wichtigste Eigenschaft des Ausgangsprozesses, der Markov-Charakter, schon verloren ist. Es ist nämlich eine nichtanaloge Abbruchwahrscheinlichkeit $p_a^*(x_1, \dots, x_i)$ anstatt $p_a(x_i)$ eingesetzt worden (entsprechend auch eine nichtanaloge Überlebenswahrscheinlichkeit $p_{sc}^* = 1 - p_a^*$), die außer von X_i auch von den in der Vergangenheit des Teilchens liegenden Zuständen x_1, \dots, x_{i-1} abhängt. Auch für diesen Fall bleibt der Satz 3.4.1 ohne Änderung des Beweises richtig, sogar die Übergangswahrscheinlichkeiten des nichtanalogen Prozesses dürfen von mehreren zurückliegenden Ereignissen abhängen; die nichtanalogen endlichdimensionalen Dichten sind dann gemäß (3.1.16) anstatt (3.3.48) zu berechnen. Explizit wird also in den Codes verwendet:

$$p_a^*(x_1, x_2, \dots, x_i) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \prod_{j=1}^{i-1} \Sigma_{sc}(x_j)/\Sigma_{tot}(x_j) > W_{min} \\ \Sigma_a(x_i)/\Sigma_{tot}(x_i) & \text{sonst} \end{cases}$$

Diese speziellen nichtanalogen Abbruchwahrscheinlichkeiten sind allerdings durch den Satz 3.4.1 nicht erfaßt, da die Voraussetzung (3.4.2) verletzt ist, also die Dichte dp/dp^* nicht unbedingt existiert. Ob trotzdem korrekte Ergebnisse erhalten werden, hängt deshalb von der speziellen Form der Schätzfunktion X ab und muß im Einzelfall untersucht werden. Im hier beschriebenen Code ist dies der Fall, denn die Schätzfunktionen $X_{con,i}$, X_i und $X_{i,c}$ enthalten die Funktion p_a nicht. Der Korrekturfaktor p_a/p_a^* tritt nur beim letzten Stoßereignis auf. Dort ist aber $p_a^* \neq 0$, und er kann gegen die in der endlichdimensionalen Verteilungsdichte $f^*(x_1, \dots, x_k)$ gemäß (3.3.50) auftretende Funktion $p_a^*(x_1, \dots, x_k)$ gekürzt werden.

Die nichtanalogen Überlebenswahrscheinlichkeiten p_{sc}^* können nicht Null werden, weil dann $p_a^*=1$ gelten würde. Dieses Ereignis wäre also das letzte einer Kette, und an solchen Ereignissen werden bei obigen Schätzfunktionen die Funktionen p_{sc}^* nicht ausgewertet. Deshalb kürzen sich auch alle Faktoren p_{sc}^* wieder heraus.

Um durch die nichtanaloge Abbruchwahrscheinlich in Form der Faktoren p_{sc}^*/p_{sc} eingebrachte starke Schwankungen in der Korrekturfunktion $W(x_1, \dots, x_k)$ etwas zu dämpfen, verwenden wir im Rechencode anstatt einer Konstanten im Falle von 2- oder 3- dimensionalen Rechnungen eine ortsabhängige Funktion $W_{min}(r)$, die vor Beginn der Rechnung explizit gesetzt werden kann, und zwar am Sinnvollsten fallend mit zunehmendem poloidalen und/oder toroidalen Abstand von der Quelle für Neutralteilchen.

3.5.2 DER STOßKERN C

Die in Kapitel 3.3.4 definierten Schätzfunktionen $X=X_{con,i}$, $X=X_i$ oder $X=X_{i,c}$ enthalten keine Information über die Art der Stoßereignisse in den Punkten x_1, \dots, x_k (sofern sich diese aus dem Speziesindex oder den Geschwindigkeitskomponenten im nachfolgenden Ereignis nicht eindeutig rückschliessen lassen). In (3.3.8) hatten wir einen Index s für die Art des Prozesses (Ionisation, Umladung, Dissoziation, Wandprozeß, usw) eingeführt. Durch die Werte Σ_s/Σ_{tot} ist dann die diskrete Verteilung $p_s(x)$ gegeben, mit der bei Realisierung des Stoßkernes C zunächst festgelegt wird, welcher Art s der Stoßprozeß ist. Dies führt auf die Zerlegung

$$C(x_1 \rightarrow x_2) = \sum_s p_s(x_1) \cdot C_s(x_1 \rightarrow x_2) \quad (3.5.1)$$

des Stoßkerns, in die formal auch ein Summand $p_a \cdot C_a$ für Absorption (siehe Gleichung (3.3.38)) aufgenommen werden kann.

Ferner ist durch

$$n_s(x; i) = n_i^s(x) / \sum_j n_j^s(x) \quad (3.5.2)$$

die ebenfalls diskrete (bedingte) Verteilung für den Speziesindex i des neuen Teilchens gegeben. n_i^s bedeutet dabei gemäß (3.3.8) und (3.3.30) die mittlere Anzahl der Teilchen der Spezies i , die aus einem Stoßereignis der Art s hervorgehen.

Sind so die Indices s und i festgelegt, kann als nächstes mit der Dichte $w_s(x, i; \mathbf{v})$ der neue Geschwindigkeitsvektor \mathbf{v} bestimmt werden (siehe (3.3.11) und (3.3.34)). Der normierte Kern C ist also zerlegt in:

$$C(i_1, r_1, \mathbf{v}_1 \rightarrow i_2, \mathbf{v}_2) = \sum_s p_s(i_1, r_1, \mathbf{v}_1) \cdot n_s(i_1, r_1, \mathbf{v}_1; i_2) \cdot w_s(i_1, r_1, \mathbf{v}_1, i_2, \mathbf{v}_2) \quad (3.5.3)$$

Wird nur einer der Faktoren eines Summanden durch einen nichtanalogen ersetzt, dann muß auch nur für diesen Teil in der Funktion W von (3.4.3) eine Gewichtskorrektur angebracht werden. Durch Veränderungen in der Verteilung $n_s(x; i)$ kann zum Beispiel eine mehr interessierende (oder eine für eine gute Statistik zu selten auftretende) Spezies zu Lasten einer anderen bevorzugt werden.

Ein weiteres Beispiel ist die Erfassung von Anisotropieeffekten bei Umladungsstößen durch eine nichtanaloge Dichte w_s^* , indem man in solch einem Fall die neue Geschwindigkeit des Teilchens aus einer Maxwellverteilung mit der Iontemperatur am Stoßort sammelt und Abweichungen hiervon analytisch in der Funktion W von (3.4.3), also durch Gewichtskorrektur erfaßt.

3.5.3 DER TRANSPORTKERN T

Der Übergang zu einem nichtanalogen Transportkern T ist immer dann nötig, wenn Testteilchen in Teile des Gefäßes gebracht werden sollen, in die sie

andernfalls nur zu selten kämen, um ausreichende statistische Genauigkeit zu garantieren. Die im Rechencode eingesetzten Verfahren sind denen in Neutronencodes analog, und es sind leichte Verallgemeinerungen der auch in den Neutralgascodes /0.5/, /0.6/ und /0.8/ verwendeten "Splitting- und Russisch-Roulette"-Strategie. Die "Splitting-Technik" bedeutet anschaulich, daß ein Testteilchen die Chance hat, sich in mehrere unabhängige Teilchen aufzuspalten, ohne daß solch ein Prozeß im physikalischen Modell enthalten wäre. Dem wird wieder durch Faktoren in der Korrekturfunktion W Rechnung getragen. Es gibt ausführliche Untersuchungen darüber, wann und wo solche künstlichen Spaltungsprozesse günstig einsetzbar sind, und wie stark sie sein sollten (/3.37/, /3.44/, /3.45/ und /3.46/). In den oben erwähnten Neutralgascodes sind übereinstimmend einige ineinanderliegende Torusflächen (genauer: Zylinderflächen, wegen der Zylinderapproximation des Torus in diesen Codes) als sogenannte "Splitting-Flächen" ausgezeichnet, die, wenn sie von einem nach innen (also in Richtung auf die magnetische Achse) fliegenden Teilchen getroffen werden, solche Spaltungsprozesse auslösen. Um den poloidalen und toroidalen Abfallängen der Neutralgasprofile bei nicht gleichmäßig über eine Torusfläche verteilten Quellen besser Rechnung tragen zu können, besteht im hier beschriebenen Code die Möglichkeit, die Stärke dieser Spaltungsprozesse nicht nur von einer radialen, sondern auch von einer poloidalen und toroidalen Koordinate abhängig festzulegen.

Die "Russisch-Roulette"-Technik beruht auf einer speziellen nichtanalogen Abbruchwahrscheinlichkeit (Kap. 3.5.1) und wird verwendet, um die schon in Kap. 3.4 erwähnten ausreichend starken nichtanalogen Absorptionsmechanismen sicherzustellen, die ja nun noch mit den künstlichen Spaltungsprozessen konkurrieren müssen. Die über die analogen Werte hinaus erhöhten Abbruchwahrscheinlichkeiten treffen dabei solche Teilchen, die sich in Richtung auf ein statistisch günstiges Gebiet des Gefäßes zubewegen, also etwa auf eine Quelle zu.

Wie im Einzelfall dieser nichtanaloge Kern T^* zu definieren ist, kann aus den vom Rechencode selbst erstellten und im nächsten Kapitel gezeigten 2-dimensionalen Grafiken des Variabilitätskoeffizienten abgelesen werden und richtet sich auch danach, für welche Gebiete man sich (zu Lasten an-

derer) eine besonders große Genauigkeit der Ergebnisse wünscht. Einige diesbezügliche technische Details sind im Anhang B angeführt.

Theoretische Möglichkeiten in der Bestimmung optimaler nichtanaloger Dichten liegen in der Benutzung der in Kapitel 3.3.2 erwähnten adjungierten Transportgleichung (/3.37/, /3.43/). Im theoretischen Grenzfall, wenn die exakte Lösung der adjungierten Gleichung bekannt ist, kann ein Monte-Carlo-Algorithmus angegeben werden, bei dem man nur ein einziges "Testteilchen" benötigt, um einen statistischen Fehler gleich Null zu erzielen.

3.6 DER GEOMETRISCHE BLOCK

Das Rechenprogramm, mit dem die Simulationen durchgeführt wurden, ist den Überlegungen der vorangehenden Abschnitte entsprechend strukturiert. Es besteht aus (mit unterschiedlich starkem Arbeitsaufwand) auswechselbaren Blöcken ("Subroutinen"), deren wichtigste ein Block für die Realisierung der Quellenverteilungsdichte (sehr leicht austauschbar), je ein Block für die Kerne T und C (mittlerer Aufwand, einige Tage) und ein Block zur Auswertung der Schätzfunktion (praktisch sofort Übergang zu anderen Funktionen $g(x)$ im Ausdruck (3.3.51) möglich) sind. Ferner ist auch ein recht allgemeiner, aber nur schwer austauschbarer, geometrischer Block vorhanden. Die geometrische Gestalt des Gefäßes sowie die Geometrie des Plasmas sind für verschiedene Divertor- und Limitertypen (siehe Kapitel 1) recht unterschiedlich. Während z.B. bei Poloidalfelddivertoren oder toroidalen Limitern die toroidale Koordinate auf Grund der dann vorliegenden Symmetrieverhältnisse unwichtig ist, und die Ergebnisse in einem poloidalen Querschnitt gut aufgelöst sein müssen, ist bei poloidalen Limitern in Zylinderapproximation zusätzlich zur radialen auch hinsichtlich der in Richtung der Zylinderachse liegenden Koordinate aufzulösen. Bei Tori mit kleinen toroidalen Krümmungsradien (klein gegen eine durch die mittlere freie Weglänge für das Neutralgas bestimmte Länge) sind zusätzlich toroidale Effekte zu berücksichtigen. Der in diesem Abschnitt be-

schriebene geometrische Block ist diesen Anforderungen entsprechend entwickelt worden.

3.6.1 ALLGEMEINE GESTALT DES BLOCKES

Folgendes muß von dem Block geleistet werden:

Der interessierende 3-dimensionale Bereich muß mit einem Netz Σ von Flächen S_i , $i=1,2,\dots,n$ diskretisiert werden. Jede dieser Flächen S_i sei definiert durch Λ_i Gleichungen:

$$f_{\lambda}^i(x,y,z) = 0 \quad \lambda = 1, \dots, \Lambda_i \quad (3.6.1a)$$

und eventuell für jedes λ noch π_{λ} Ungleichungen

$$g_{\lambda,\eta}^i(x,y,z) > 0 \quad \eta = 1, \dots, \pi_{\lambda} \quad (3.6.1b)$$

Um dann mit einer Weglängenschätzfunktion arbeiten zu können, muß folgendes Problem gelöst werden: Das "Testteilchen" bewege sich von einem Punkt r_0 in Richtung des Einheitsvektors v_0^e . Gesucht ist dann der Schnittpunkt der durch

$$G: r = r_0 + tv_0^e$$

definierten Geraden mit derjenigen unter den Flächen S_i mit minimalem positiven t . Durch sukzessives Ausführen dieses Algorithmus mit jeweiligem Transport des Teilchens von r_0 zu diesem Schnittpunkt läßt sich der Weg des Teilchens durch das Plasma zwischen zwei Stößen verfolgen, andererseits sind alle benötigten Größen längs dieses Weges, z.B. Stoßquerschnitte und Weglängen in den einzelnen Zellen, verfügbar.

Neben den Auswertungen der Schätzfunktion wird bei der Ausführung dieses Programmteils der Hauptteil der wie bei allen Monte-Carlo-Codes im Vergleich zu numerischen oder gar analytischen Verfahren beträchtlichen Re-

chenzeit verbraucht. Deshalb müssen die Flächen S_i möglichst einfach definiert sein.

3.6.2 1-DIMENSIONALES FLUßFLÄCHENGITTER

Damit der Code als "Neutralgasmodul" innerhalb eines Plasma-Transportcodes einsetzbar ist und weil in diesem Fall die benötigten Größen (nach Kap. 2.1) die über Flußflächen gemittelten und durch Plasma-Neutralgas-Wechselwirkung bedingten Quell- und Verlustterme für Teilchen und Energiediffusionsgleichungen sind, wird für 1-dimensionale Rechnungen (Auflösungen der Neutralgasprofile nur nach einer Koordinate ρ , die die magnetischen Flächen indiziert) mit dem System Σ die Flußflächengeometrie approximiert.

Die geometrisch einfachste Form, die zugleich den 1-d-Transportcodes zu Grunde liegt, ist ein zylindrisches Plasma mit konzentrischen kreisförmigen Flußflächen. Dann ist zu setzen:

$$f_1^i(x,y,z) = 0 = x^2 + y^2 - r_i^2 \quad , \quad i=1,2,\dots,n_r \quad (3.6.2)$$

Die Radien r_i definieren also ein radiales Gitter (Bez.: Σ_c) und im geometrischen Block müssen nur quadratische Gleichungen gelöst werden. Als zweite Option kann ein (nicht notwendig konzentrisches oder konfokales) Netz aus Ellipsen gewählt werden:

$$f_1^i(x,y,z) = 0 = (x-e_i)^2 + (y/ell_i)^2 - r_i^2 \quad i=1,2,\dots,n_r \quad (3.6.3)$$

(Bez.: Σ_e). ell_i ist die Elliptizität einer Ellipse, deren eine Halbachse auf der x-Achse liegt und den Wert r_i hat, durch e_i kann eine Verschiebung der Plasmaachse (nach außen) erfaßt werden ("Shafranov-Shift", bedingt durch toroidale Effekte auf das MHD-Gleichgewicht, /2.10/), wie sie in neueren Tokamaksimulationen ebenfalls auftreten, wenn die gekoppelten Gleichungen für Plasmatransport und Plasmagleichgewicht gleichzeitig gelöst werden (/3.29/, /2.16/). Mit der elliptischen Plasmaform wird verti-

kal elongierten Konfigurationen (/2.11/) Rechnung getragen. Zur besseren Anpassung an die numerisch berechneten MHD-Gleichgewichte, die eine leichte trianguläre Deformation der Ellipsen (/2.9/) aufweisen, die auch in den zur Zeit in Betrieb gehenden großen Tokamaks JET und TFTR (Princeton) vorliegen, ist als dritte Option im Rechencode ein Netz Σ_d vorhanden:

$$\begin{aligned}
 f_1^i(x,y,z) &= 0 = (x-e_i)^2 + (y/ell_{r,i})^2 - r_{r,i}^2 \\
 g_{1,1}^i(x,y,z) &= x-e_i \geq 0 \\
 f_2^i(x,y,z) &= 0 = (x-e_i)^2 + (y/ell_{l,i})^2 - r_{l,i}^2 \\
 g_{2,1}^i(x,y,z) &= e_i-x \geq 0
 \end{aligned}
 \tag{3.6.4}$$

Es handelt sich bei jeder Kurve also um zwei halbe Ellipsen, mit einer gemeinsamen Halbachse aber verschiedenen Elliptizitäten ell_r (rechts) und ell_l (links).

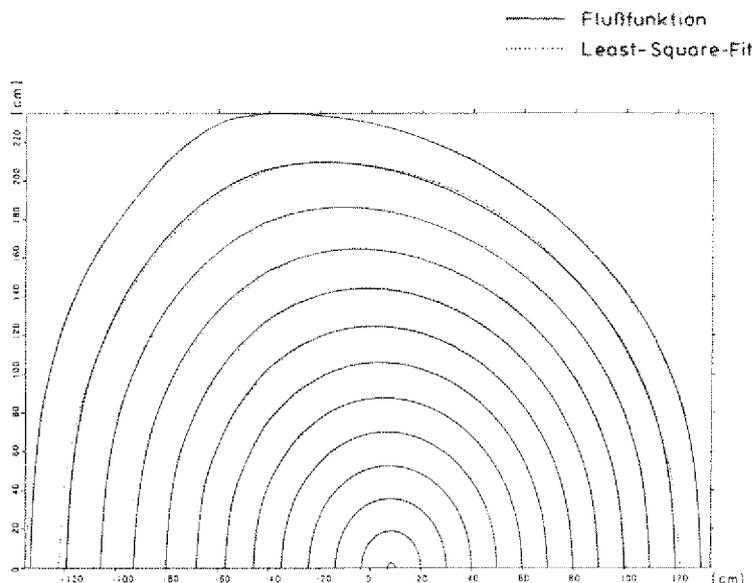


Abbildung 6. Flußfunktion: D-förmiges Plasma und Least-Squares-Fit für das Netz Σ_d

In der Abbildung 6 ist eine mit dem Gleichgewichtscod "Island" für einen Standardfall (Tab. 4.1.1) eines JET-Plasmas errechnete Flußfunktion (niedrig- β , Plasmastrom $I_p = 480$ kA, /2.12/) gezeigt. Die gestrichelten

Linien, die nur an den äußeren Flußflächen erkennbar von den tatsächlichen Flußlinien abweichen, wurden daraus mit einem "Least-Square"-Ansatz für Funktionen der Form Σ_d erhalten, wobei zur Lösung des dabei auftretenden nichtlinearen Gleichungssystems ein "Newton-Iterations"-Verfahren eingesetzt wurde.

3.6.3 ZWEI- UND DREIDIMENSIONALE NETZE

Dem Monte-Carlo-Algorithmus angemessen geschieht die Erweiterung auf den echt 2-dimensionalen Fall durch Hinzunahme von n_p weiteren Flächenstücken zu dem System Σ_c , Σ_e oder Σ_d , d.h.:

$$f_1^{n_r+j}(x,y,z) = 0 = \cos(\theta_j) \cdot x - \sin(\theta_j) \cdot y \quad j=1,2,\dots,n_p$$

$$g_{1,1}^{n_r+j}(x,y,z) = \begin{cases} y & \text{falls } 0^\circ \leq \theta_j \leq 180^\circ \\ -y & \text{falls } 180^\circ < \theta_j < 360^\circ \end{cases}$$

(3.6.5)

wobei θ die poloidale Koordinate sei, die also auf diese Weise diskretisiert wird (Bez.: $\Sigma_{c,p}$, $\Sigma_{e,p}$, und $\Sigma_{d,p}$).

Weil sich an dem ganzen Simulationsvorgang durch diese zusätzlichen Flächen (außer im geometrischen Block) nichts ändert, kann man die poloidale Auflösung der Profile als z.B. durch eine logische Variable gesteuerte Option verwenden, die Dimensionalität des Monte-Carlo-Codes ist also den jeweils vorliegenden Symmetrieverhältnisse anpaßbar.

Ebenso kann man anstatt der n_p poloidal verteilten Flächen auch n_z in z-Richtung (Richtung der Zylinderachse bei angenommener Zylinderapproximation des Torus) verteilte Flächen hinzufügen (Bez.: $\Sigma_{c,z}$, $\Sigma_{e,z}$ und $\Sigma_{d,z}$), also:

$$f_1^{n_r+k}(x,y,z) = 0 = z_k - z \quad k=1,2,\dots,n_z$$

(3.6.6)

und erhält so als weitere Option in dieser Richtung aufgelöste Ergebnisse.

Wählt man beide Optionen gleichzeitig, nimmt also das aus $n_r + n_p + n_z$ Flächen bestehende System (Bez.: $\Sigma_{c,3}$, $\Sigma_{e,3}$ und $\Sigma_{d,3}$), dann kann man 3-dimensional aufgelöste Profile berechnen. Zur Zeit ist im Rechencode Speicherplatz vorgesehen für

$$n_r \leq 50, n_p \leq 30, n_z \leq 30.$$

Durch zusätzliche geometrische Rechnungen erhöht sich die notwendige Rechenzeit für eine feste Zahl von Historien, jeweils bezogen auf den einfachsten Fall Σ_c , um etwa 5% bei Übergang zu Σ_e , um 10% bei Übergang zu Σ_d , um jeweils 20% bei Hinzunahme der Auflösung in eine zusätzliche Richtung. Allerdings ist zu beachten, daß bei fester Historienzahl höher aufgelöste Profile auch einen größeren statistischen Fehler aufweisen.

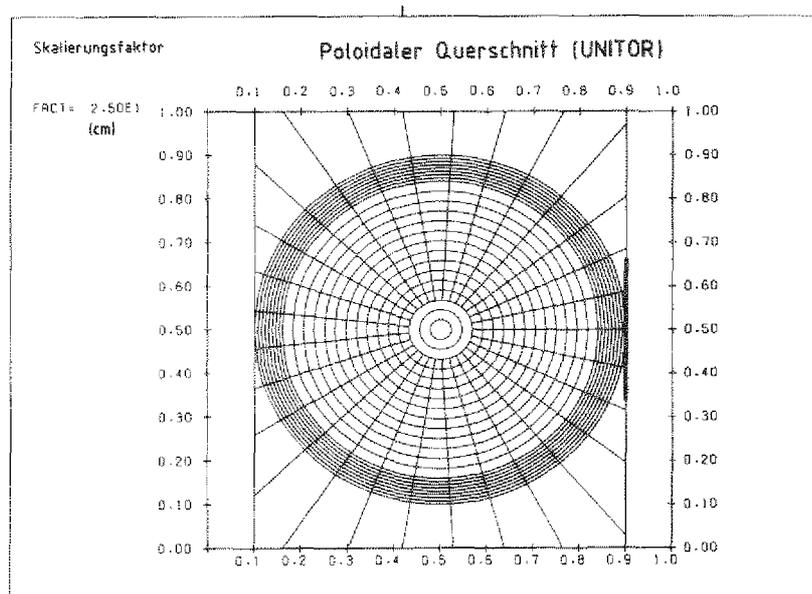


Abbildung 7. Poloidaler Querschnitt von UNITOR: Netz $\Sigma_{c,p}$ mit weiteren Flächenstücken zur Nachbildung des rechteckigen Gefäßquerschnittes

Um eventuell stark von der Form der äußersten Fläche S_{n_r} abweichende Gefäßformen berücksichtigen zu können, kann jedes der bislang erwähnten Systeme noch um derzeit bis zu 12 gerade Flächenstücke, die ebenfalls parallel zur z-Achse liegen, erweitert werden. Durchdringt ein Testteilchen dann die äußerste Fläche S_{n_r} , so wird in diesem Fall noch nicht das Reflexionsmodell abgerufen, sondern das Teilchen wird zunächst

bis zur Kammer, definiert durch diese 12 Flächenstücke, weiterverfolgt und dort gegebenenfalls reflektiert. Abbildung 7 zeigt einen poloidalen Querschnitt, wie er bei den Rechnungen mit UNITOR-Daten (Tab. 4.1.1) verwendet wurde (kreisförmiges Plasma und rechteckige Kammer).

3.6.4 TOROIDALE EFFEKTE

Die Zylinderapproximation drückt sich in den Netzen Σ_c , Σ_e und Σ_d dadurch aus, daß die Gleichungen nicht von z abhängen. Um toroidale Effekte berücksichtigen zu können, könnte man die dort auftretenden quadratischen Gleichung durch Torusgleichungen (algebraische Gleichungen 4. Ordnung) ersetzen. In /3.32/ ist z.B. ein (halb algebraisch- halb analytischer) Algorithmus zur schnellen Berechnung der reellen Nullstellen solcher Gleichungen angegeben. Um aber die toroidalen Effekte ähnlich wie bei der Auflösung der Profile nach einer zusätzlichen Koordinate als leicht abzurufende Option zu erhalten, kann im hier verwendeten geometrischen Block ein Torus durch n_t schräg abgeschnittene Zylinder approximiert werden, es wird also die magnetische Achse durch einen geschlossenen Polygonzug ersetzt (Abbildung 8 auf Seite 95). Dazu verwenden wir ein System Σ_c , Σ_e , Σ_d oder $\Sigma_{c,p}$, $\Sigma_{e,p}$, $\Sigma_{d,p}$ nun zur Definition der geschlossenen Leitlinien eines geraden Zylinders, der nach oben (positive z -Richtung) durch die Ebene:

$$f_o(x,y,z) = 0 = z - (R+x) \cdot \tan(\pi/n_t) \quad (3.6.7a)$$

und nach unten (negative z -Richtung) durch die Ebene

$$f_u(x,y,z) = 0 = z + (R+x) \cdot \tan(\pi/n_t) \quad (3.6.7b)$$

begrenzt wird. Damit ist für jedes der oben angegebenen Netze eine "toroidale Basiszelle $\Sigma^{t,1}$ " ausgezeichnet (R steht für den großen

Radius des Torus). Ferner sei $h(x,y,z)$ die Drehung:

$$\begin{aligned} x' &= h_1(x,y,z) = (x+R) \cdot \cos(2\pi/n_t) - z \cdot \sin(2\pi/n_t) - R \\ y' &= h_2(x,y,z) = y \\ z' &= h_3(x,y,z) = (x+R) \cdot \sin(2\pi/n_t) + z \cdot \cos(2\pi/n_t) - R \end{aligned} \quad (3.6.8)$$

Transformiert man die die toroidale Basiszelle definierenden Gleichungen mit h , erhält man eine angrenzende toroidale Zelle, formal: $h(\Sigma^{t,1}) = \Sigma^{t,2}$, und so weiter: $h(\Sigma^{t,n}) = \Sigma^{t,n+1}$, insbesondere ist also $\Sigma^{t,n_t+1} = \Sigma^{t,1}$. Dies ist in der Computergrafik Abbildung 8 dargestellt, aus programmtechnischen Gründen sieht es dort so aus, als wären die Leitkurven ebenfalls Polygonzüge; im Rechencode werden aber die in Kap. 3.6.1 angegebenen quadratischen Gleichungen tatsächlich verwendet.

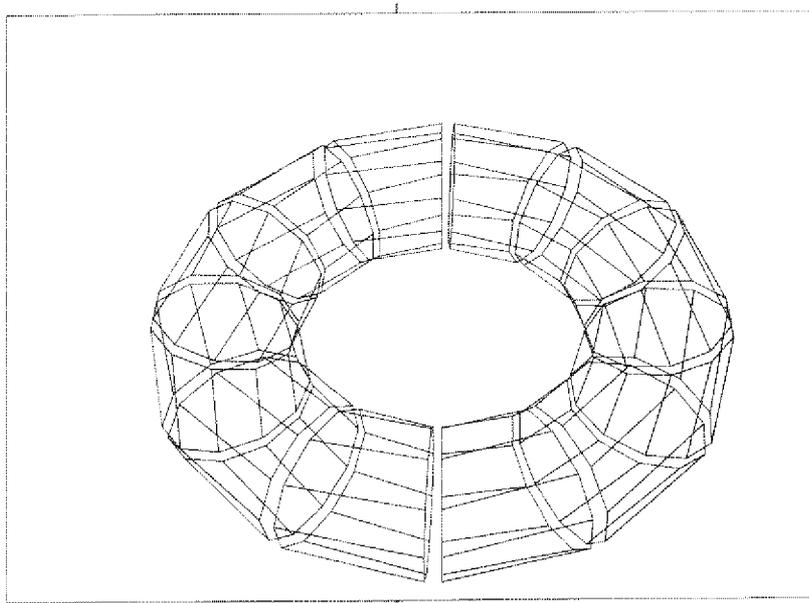


Abbildung 8. Approximation des Torus: n_t schräg abgeschnittene Zylinder, hier: $n_t=12$

Bei der Ausführung dieses Blockes werden allerdings nicht die Gleichungen der Basiszelle transformiert, sondern, was das Gleiche bedeutet, die Flugbahnen der Testteilchen in entgegengesetzte Richtung. Verläßt also ein Teilchen z.B. die Basiszelle nach oben (durch die Fläche f_0 , (3.6.7a)), dann wird der Geschwindigkeitsvektor gedreht und das Teilchen

an gleicher Stelle unten (auf der Fläche f_u , (3.6.7b)) wieder gestartet. Wählt man diese Option, so erhöht sich die Rechenzeit bei gleicher Teilchenzahl und für $n_t=40$ um ca. 10% gegenüber dem Fall in dem die Flächen f_o und f_u nicht gesetzt sind (Zylinderapproximation).

3.6.5 LIMITERFLÄCHEN

In der Abbildung 9 auf Seite 97 ist ein Computerplot der geometrischen Eingabedaten unseres Simulationsmodells des Pumpimiters ALT-I für TEXTOR gezeigt. Zusätzlich zu den durch das System Σ_d und den die Kammer darstellenden Flächen (hier: ein Viertel des Torus) sind hier weitere "Limiter-Flächen" gezeigt. Durch sie (zur Zeit bis zu 24 Flächen) ist der geometrische Block erweitert worden. Im Unterschied zu den "Kammerflächen" (nach Kap. 3.6.3) müssen diese nicht außerhalb der äußersten radialen Fläche S_{n_r} liegen, ferner kann nicht nur wie bei den Kammerflächen je ein Reflexionsmodell, sondern auch je eine Quellenverteilungsdichte (siehe Kapitel 4.1.1 und 4.1.2) definiert werden. Darüberhinaus werden sie durch allgemeinere algebraische Gleichungen festgelegt, nämlich:

$$\begin{aligned}
 f_1^i(x,y,z) &= a_1^i + a_2^i \cdot x + a_3^i \cdot y + a_4^i \cdot z + a_5^i \cdot x^2 + a_6^i \cdot y^2 + a_7^i \cdot z^2 \\
 &\quad + a_8^i \cdot xy + a_9^i \cdot xz + a_{10}^i \cdot yz = 0 \quad i=1,2,\dots,24 \\
 g_{1,1}^i(x,y,z) &= x - x_1^i \quad ; \quad g_{1,3}^i(x,y,z) = y - y_1^i \quad ; \quad g_{1,5}^i(x,y,z) = z - z_1^i \\
 g_{1,2}^i(x,y,z) &= x_2^i - x \quad ; \quad g_{1,4}^i(x,y,z) = y_1^i - y \quad ; \quad g_{1,6}^i(x,y,z) = z_1^i - z
 \end{aligned}
 \tag{3.6.9}$$

Es handelt sich also um Ebenenstücke ($a_j^i=0$ für $j>4$) oder Flächen zweiter Ordnung. Nach wie vor sind nur quadratische Gleichungen zu lösen, um eventuelle Schnittpunkte der Flugbahnen der Testteilchen mit einer dieser Flächen zu berechnen.

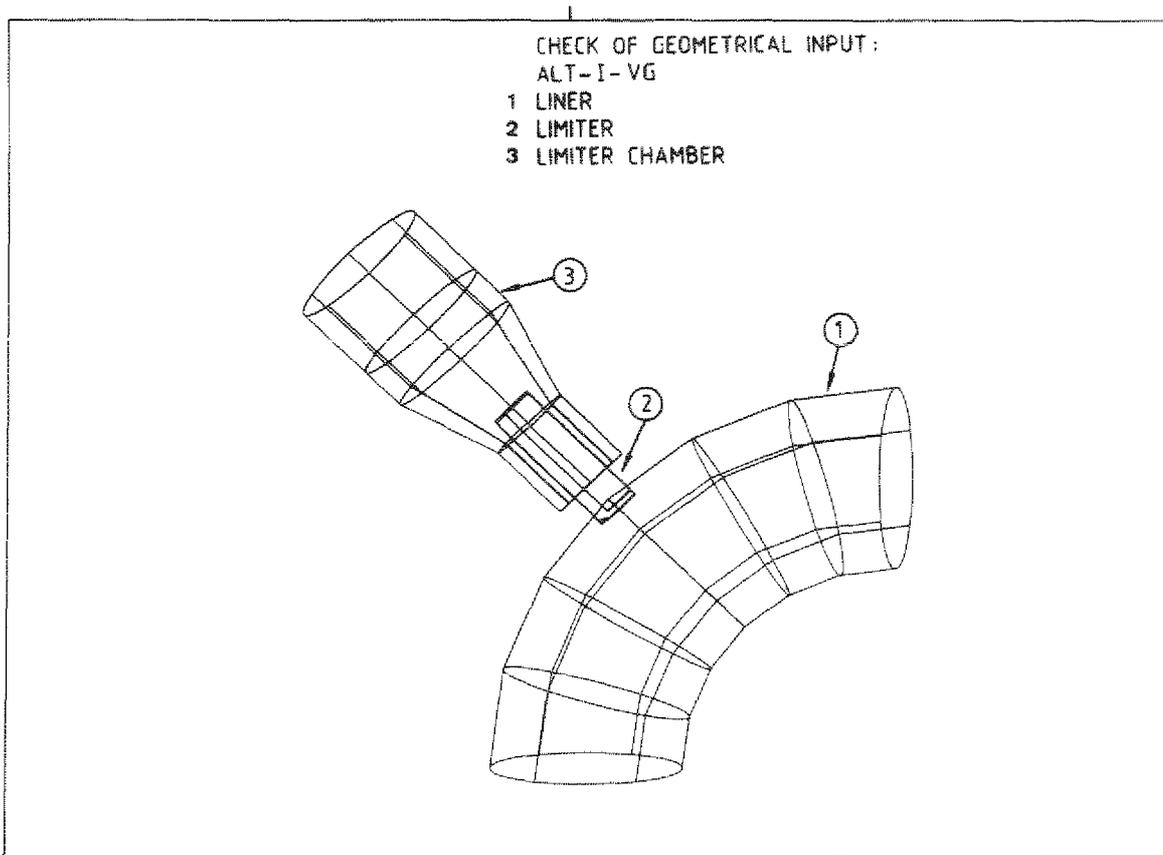


Abbildung 9. Limiterflächen: 3D-Computermodell für Pumplimiter ALT-I, Plott geometrischer Eingabedaten

Durch die sechs Ungleichungen $g_{1,k}^i \geq 0$, $k=1,2,\dots,6$ wird der Ausschnitt der Fläche festgelegt, der als Limiter, Prallplatte oder sonstige Struktur wirken soll, von der aus Neutralteilchen ins Gefäß starten und/oder an der sie reflektiert (oder absorbiert) werden, wenn sie dort auftreten. Quadratische Ausdrücke in den $g_{1,k}^i$ sind ebenfalls möglich, sollten aber aus Rechenzeitgründen vermieden werden. Das noch freie gemeinsame Vorzeichen der Koeffizienten benutzen wir zur Festlegung der Orientierung der Flächen, denn die Quellverteilungen und Reflexionsmodelle benötigen die "nach innen gerichtete" Normalenrichtung auf den Flächen.

4.0 ANWENDUNGEN BEI FESTEM PLASMAHINTERGRUND

In diesem Kapitel sollen einige mit dem Monte-Carlo-Code erhaltene Simulationsergebnisse angegeben werden, denen Plasmadaten aus bereits arbeitenden oder in naher Zukunft in Betrieb gehenden Tokamaks (JET) zu Grunde liegen. Um das jeweils simulierte Modell genau angeben zu können, fixieren wir zunächst einige Standardmodelle, denen jeweils ein Datensatz von Eingabeparametern eindeutig entspricht.

4.1 STANDARDMODELLE

Die Geometrie des Gefäßes und die Bauteile der Brennkammer sind durch jeweils eines der Systeme des in Kapitel 3.6 beschriebenen geometrischen Blockes im Modell enthalten. Allen hier zusammengestellten Ergebnissen liegen Plasmamparameter zu Grunde, die auf dem radialen Gitter diskretisiert sind. Zwischen zwei solchen Flächen werden diese Parameter als konstant angesehen (dadurch wird die Realisierung des Transportkerns T erleichtert, siehe Anhang B.1).

Die Profile für Dichten n_e , n_i ($=n_e$ in dieser Arbeit) und Temperaturen T_e , T_i für Elektronen bzw. Ionen haben die Form:

$$\begin{aligned} Pl(\rho) &= Pl(s) + (1 - (\rho/s)^p)^q \cdot (Pl(o) - Pl(s)) & 0 \leq \rho \leq s \\ Pl(\rho) &= Pl(s) \cdot \exp(-(\rho-s)/\lambda) & s \leq \rho \leq a \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

Dabei sind p, q und λ Profilparameter, $\rho = (Vol/2\pi^2 R)^{1/2}$ ist eine Koordinate, die die Flußflächen indiziert (Vol ist das eingeschlossene Torusvolumen, R wieder der große Radius, und für ein System aus konzentrischen Kreistori geht ρ in den kleinen Radius r über). Mit Hilfe von s kann zwischen einem rein algebraischen ($s=a$), einem rein exponentiellen ($s=0$) und einem gemischten Profil gewählt werden. Durch $\rho=a$ ist die äußerste Flußfläche gekennzeichnet. In Tabelle 4.1.1 sind Da-

ten einiger hier exemplarisch simulierter Modelle zusammengestellt. Der Datensatz U soll die in dem kleinen Tokamak UNITOR vorliegenden Verhältnisse erfassen (/0.7/, /4.4/), Datensatz A ist eine Anpassung an in ASDEX gemessene Parameter (/4.5/, /4.6/), T und J sind Datensätze zur Simulation TEXTOR- bzw. JET-relevanter Bedingungen (/4.7/-/4.10/). Ergebnisse von Simulationen mit INTOR-Daten (dort: neun neutrale Spezies H, D, T, H₂, D₂, T₂, HD, HT, DT berücksichtigt) sind in /4.11/ angegeben. In /4.12/, /3.27/ und /3.28/ wurde der Code zur Simulation des Neutralgases in der Divertorkammer des Poloidalfelddivertors an ASDEX eingesetzt.

Tabelle 4.1.1 U A T J

	U	A	T	J
Geometrie				
kleiner Radius a (cm)	10	45	55	156
Separatrix s (cm)	8.5	40	50	s=a
großer Radius R (cm)	30	165	175	326
Gefäßgeometrie - poloidaler Querschnitt	Rechteck 20x25	Kreis p=55	--	--
Elliptizität der äußersten Fläche	1	1	1	1.32 ¹ (rechts) 2.22 ¹ (links)
Verhältnis: a zu kleiner Radius links	1	1	1	1.68
Verschiebung der Plasmaachse e (cm)	0	0	0	-60 ¹
Plasmaparameter				
Elektronentemp. (eV)				
bei ρ=0	160	736	650	10000
ρ=s	10	10	25	--
ρ=a	3.7	0.4	1	10
Profilparameter p	2.0	1.10	2.0	2.0
q	1.0	1.38	1.0	2.0
Ionentemperatur (eV)				
bei ρ=0	50	429	600	10000
ρ=s	10	48	25	--
ρ=a	3.7	1.7	1	10
Profilparameter p	2.0	3.37	2.0	2.0
q	1.0	2.34	1.0	2.0
Dichte (1/cm ³)				
bei ρ=0	2e13	4.30e13	3.7e13	1e14
ρ=s	1e13	3.30e13	3.7e12	--
ρ=a	3.7e12	4.5e11	2e11	0
Profilparameter p	2.0	1.51	4.0	2.0
q	1.0	0.67	1.0	1.0

¹ siehe (3.6.4)

Die in Kapitel 4.2 bis 4.5 zusammengestellten Ergebnisse sollen zeigen, daß mit dem hier beschriebenen Code innerhalb modellbedingter und statistischer Abweichungen andere veröffentlichte Neutralgassimulationen und in gewissem Umfang auch Experimente nachvollzogen werden können.

Das Testen von Monte-Carlo-Codes ist aus prinzipiellen Gründen sehr aufwendig, nicht zuletzt, weil anders als bei auf numerischen Verfahren beruhenden Codes selbst grobe Programmierfehler oft durchaus vernünftig erscheinende, aber eben falsche Ergebnisse liefern.

Um dieses Risiko möglichst klein zu halten, haben wir neben Vergleichen mit andernorts erhaltenen Ergebnissen vor allem für eine umfangreiche interne Diagnostik des Rechencodes gesorgt. Dazu gehören Teilchen- und Energiebilanzen, die in allen bisher durchgeführten Simulationen gut (1-2%) stimmten, obwohl die einzelnen Beiträge statistischen Schwankungen unterliegen. Ferner werden in kurzen Testläufen die einzelnen Ergebnisse auf mehrere verschiedene Arten erhalten, was auf Grund der verschiedenen Schätzverfahren, zwischen denen gewählt werden kann, möglich ist. Die Ergebnisse werden dann mittels Varianzanalyse auf "zufällige" oder systematische Abweichungen hin untersucht.

Als wichtigste Testhilfe erwies sich die bei 1-D- oder 2-D-Rechnungen bestehende Möglichkeit, die Profile eine Dimension höher aufzulösen als in den endgültigen Ergebnissen nötig.

Vergleiche mit analytischen Ergebnissen, die das Strömen ins Vakuum betreffen, wurden wie auch schon für den 2-D-Code von /0.8/ durchgeführt und ergaben sehr gute Übereinstimmung, was eine gewisse Sicherheit für Simulationen mit großen freien Weglängen (gegen die Gefäßabmessungen) gibt.

Im anderen Extremfall, für die Simulation des Neutralgasverhaltens in einem heißen dichten Plasma wurden in Culham (England) für JET-Parameter und für ein stark vereinfachendes Modell Vergleiche mit analytischen Rechnungen durchgeführt, was gleichfalls befriedigende Ergebnisse brachte (/4.9/, /4.19/).

4.1.1 QUELLEN

Da in der linearen Transportgleichung (3.3.66) die Quellenverteilungsdichte $Q(x)$ die Inhomogenität ist, können die zu verschiedenen Quellen $Q_i(x)$ (zur Zeit im Rechencode: $1 \leq i \leq 6$) gehörenden Neutralgasprofile einzeln berechnet und dann linear überlagert werden, wobei die skalaren Faktoren durch die einzelnen Quellstärken Q_i (1/sec) gegeben sind, also:

$$Q(x) = \sum_i Q_i \cdot Q_i^*(x) \text{ mit } Q_i = \int dx Q_i(x) \text{ und } Q_i^*(x) = Q_i(x) / Q_i$$

Folgende Optionen sind derzeit fest programmiert:

1. Verteilung im Ortsraum:

- a. Die Teilchen starten in der Äquatorialebene am äußeren Plasmarand mit den Koordinaten: $x=a, y=0, z=0$.

Bei Verwendung des Netzes Σ_c (definiert in 3.6.2) des geometrischen Blockes entspricht dem eine gleichmäßige Einströmung durch den Zylindermantel. Wählt man Σ_e (3.6.3), Σ_d (3.6.4), eines der Netze $\Sigma_{c,p}$, $\Sigma_{e,p}$, $\Sigma_{d,p}$ (3.6.5) oder eines der bisher genannten 6 Netze mit den zusätzlichen toroidalen Rotationsflächen 3.6.7, so entspricht dem eine gleichmäßige Linienquelle, wobei die Linie in der poloidalen Position $x=a, y=0$ toroidal umläuft bzw. bei Zylinderapproximation parallel zur Zylinderachse verläuft.

Wählt man eines der Netze $\Sigma_{c,z}$, $\Sigma_{e,z}$, $\Sigma_{d,z}$ (3.6.6) oder eines der im Anschluß daran definierten Netze $\Sigma_{c,3}$, $\Sigma_{e,3}$ oder $\Sigma_{d,3}$ jeweils wieder mit oder ohne Berücksichtigung toroidaler Effekte, so entspricht diese Einströmung einer Punktquelle, im Falle des Netzes $\Sigma_{c,z}$ auch einer bei $z=0$ poloidal umlaufenden gleichmäßigen Linienquelle.

- b. Mit Hilfe einer vorgebbaren Dichte $f(\rho)$ wird die durch ρ indizierte radiale Fläche (die eine Flußfläche approximieren soll) bestimmt. Der Startpunkt des Testteilchens wird dann aus einer Gleichverteilung auf dieser Fläche gesammelt. $f(\rho)$ kann z.B. aus der Rate für Strahlungsrekombination berechnet sein, siehe Kapitel 4.1.3

- c. Durch eine vorgebbare diskrete Verteilung wird eine der "Limitierflächen" (3.6.9) bestimmt. Für jede dieser Flächen muß eine Verteilungsdichte $f(\mathbf{r})$ explizit angegeben werden, sowie ein Algorithmus zur Berechnung von Zufallsvektoren \mathbf{r} . Dieser Algorithmus wird extern programmiert und mit dem Chi-Quadrat-Test (siehe z.B. /3.47/) überprüft. Dann wird dieser Programmteil (ohne Test) zusammen mit den Eingabeparametern für ein bestimmtes Modell zum eigentlichen Simulationscode dazugeladen.
2. Verteilung im Geschwindigkeitsraum
 - a. Monoenergetisch, ganze (Volumenquelle) oder halbe (Oberflächenquelle) isotrope oder cosinusverteilte Richtungsverteilung.
 - b. wie 2a, aber die Energie wird aus einer Maxwellverteilung mit entweder vorgebbarer oder vom Startpunkt abhängender Temperatur gesammelt.
 3. Verteilung der Speziesindices
 - a. Pro Quelle $Q_i(x)$ nur eine feste Spezies der startenden Teilchen
 - b. Der Speziesindex wird aus einer vorgebbaren (etwa aus den Ionenflüssen auf den Limiter berechneten) diskreten Verteilung gesammelt.
 4. Verwendung des Reflexionsmodells
 Nach einer der unter 2 und 3 beschriebenen Methoden wird ein Index i' und eine Geschwindigkeit \mathbf{v}' bestimmt, sowie ein Vektor \mathbf{r} nach einer der unter 1 angegebenen Verteilungen auf Oberflächen. \mathbf{v}' muß eine positive Komponente in Richtung der als "nach außen gerichtet" ausgezeichneten Flächennormale haben. Dieser Zustand $(i', \mathbf{r}, \mathbf{v}')$ wird einem auf eine Wand treffenden Ion zugeordnet, er sei aus einer Dichte $Q_{ion}(x')$ gesammelt. Auf diesen Zustand wird der für Wandprozesse in den Stoßkern C aufgenommene "Reflexionskern" $C_{Wand}(\mathbf{r}; i', \mathbf{v}' \rightarrow i, \mathbf{v})$ angewendet (siehe Kapitel 4.1.2).

Die Verteilungsdichte der Quelle für Neutralteilchen ist demnach (bis auf Normierung):

$$Q(x) = \int dx' Q_{ion}(x') * C_{Wand}(x' \rightarrow x) \quad (4.1.2)$$

Es ist zu beachten, daß bei Verwendung eines nichtanalogen

Reflexionsmodells, z.B. bei Unterdrückung der Absorption bei Wandprozessen, die nichtanaloge Quelle $Q^*(x)$ durch

$$Q^*(x) = \int dx' Q_{\text{ion}}(x') * C_{\text{Wand}}^*(x' \rightarrow x) \quad (4.1.3)$$

gegeben ist (C_{Wand}^* ist der nichtanaloge Reflexionskern). Die Gewichtsanpassung in der Funktion W von 3.4.3 lautet demnach Q/Q^* , wenn C_{Wand}^* auf ein "Ion" angewendet wird und $C_{\text{Wand}}/C_{\text{Wand}}^*$, wenn mittels C_{Wand}^* ein eine Wand treffendes Neutralteilchen reflektiert wird.

4.1.2 REFLEXIONSMODELLE

Bei einem Monte-Carlo-Algorithmus benötigt man sehr detaillierte Angaben der Übergangswahrscheinlichkeiten. Speziell in dem für Tokamak relevanten Energiebereich der auf eine Wand treffenden Ionen oder Neutralteilchen (≤ 200 eV) gibt es große Unsicherheiten in den verfügbaren Daten. Wir haben deshalb ein Reflexionsmodell aus verschiedenen in der Literatur angegebenen Werten konstruiert, welches durch einige Parameter, die zum Input des Rechencodes gehören, in gewissem Umfang variiert werden kann.

Wir haben in (3.3.9) Wandstöße mit in dem Kern C aufgenommen, indem wir die Stoßwahrscheinlichkeit gleich Eins gesetzt haben, sobald eine Flugbahn eine Wand schneidet. Der Schnittpunkt sei r_1 , die Geschwindigkeit des einfliegenden Teilchens sei v_1 , der Index für die Spezies sei i_1 , kurz wieder $x_1 = (i_1, r_1, v_1)$.

Zur Realisierung des die Wandprozesse beschreibenden Anteils C_{Wand} (3.5.1) des normierten Stoßkerns C benötigen wir gemäß (3.3.38), (3.3.34) und (3.5.3) $p_a^{\text{Wand}}(x_1)$, die Absorptionswahrscheinlichkeit an der Wand (und damit $p_{\text{sc}}^{\text{Wand}}(x_1) = 1 - p_a^{\text{Wand}}(x_1)$, die Reflexionswahrscheinlichkeit), ferner für Zustände x_1 mit $p_{\text{sc}}^{\text{Wand}}(x_1) \neq 0$ die mittleren Teilchenzahlen $c_{\text{Wand}}(x_1)$ nach der Reflexion und die Verteilungen n_{Wand} und w_{Wand} für Speziesindex und Geschwindigkeitsvektor.

Wir verwenden unterschiedliche Modelle für Moleküle und Atome und beschreiben zunächst die fest programmierten Modelle, danach die zusätzlichen Modifikationsmöglichkeiten. Dabei verzichten wir zu Gunsten besseren Verständnisses auf explizite Angabe eben genannter Funktionen.

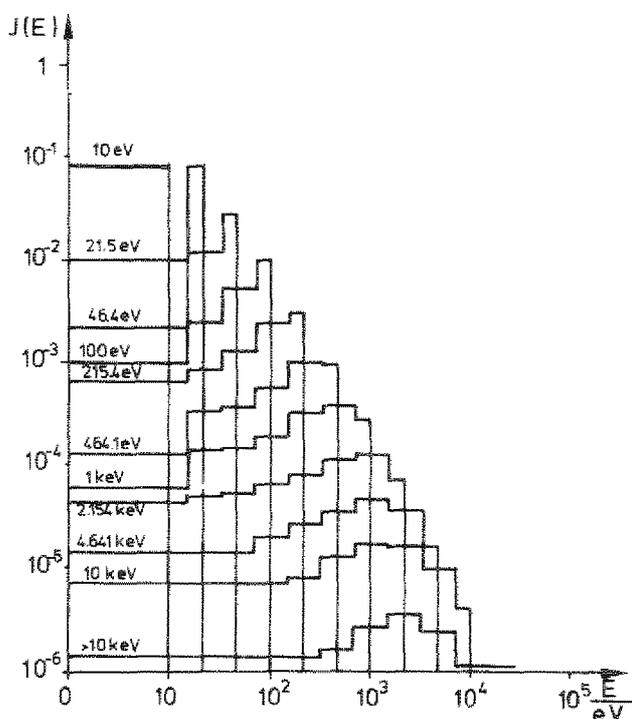


Abbildung 10. Energieverteilungsdichten reflektierter neutraler Atome: Abhängigkeit von der Einfallenergie für senkrechten Einfall, $H \rightarrow Fe$ -Target

Trifft ein neutrales Molekül auf eine Wand, so geschieht dies bei sehr kleinen (der Wandtemperatur entsprechenden) Energien, wir verwenden deshalb für Moleküle die Reflexionswahrscheinlichkeit $p_{sc,M} = 1$. Energie und Speziesindex bleiben in diesem Standardmodell unverändert, die neue Flugrichtung ist cosinusverteilt um die nach innen gerichtete Normale im Auftreffpunkt. Dieses Modell ist identisch mit den in /0.7/ und /0.8/ angegebenen Modellen.

Für Atome ist unser Reflexionsmodell aus den in /0.5/ bis /0.8/, /0.10/ sowie /4.1/-/4.3/ diskutierten Vorschlägen entstanden. Wesentliche Merkmale des als Standardfall gewählten und auch im "AURORA"-Code /0.6/ simulierten Modells sind in Abbildung 10 enthalten. $J(E)$ hat die Dimension: Teilchen pro eV und pro einfallendes Teilchen. Die Energiewerte E_i am linken Rand beziehen sich auf H-Atome oder H^+ -Ionen, die senkrecht auf ein Fe-Target treffen. Die Abszisse ist die Energie E_r der reflektierten Teilchen, und die abgebildeten Treppenfunktionen $f(E_i \rightarrow E_r)$ stellen bis auf Normierung die Verteilungsdichte für die Energie E_r dar, bei gegebenem E_i . Durch das Integral

$$p_{sc,A}(E_i, \theta=0) = \int dE_r f(E_i \rightarrow E_r) \quad (4.1.4)$$

ist die Reflexionswahrscheinlichkeit gegeben. Sie liegt hier bei 0.8 für $E_i=10$ eV und fällt dann über die Werte 0.54 bei 100 eV und 0.3 bei 1000 eV auf fast Null bei großen Energien ($E_i \geq 10$ keV) ab. θ bezeichnet den Einfallswinkel. Mittels

$$E_r^* = \int dE_r E_r \cdot f(E_i \rightarrow E_r) \quad (4.1.5a)$$

ergibt sich mit

$$R_E(E_i, \theta=0) = E_r^*/E_i \cdot p_{sc,A}(E_i, \theta=0) \quad (4.1.5b)$$

der Energiereflexionskoeffizient, der bei diesem Modell von 0.6 über 0.35 und 0.16 (bei gleichen E_i wie oben) ebenfalls auf fast Null abfällt.

Die Umrechnung auf ein anderes als das System H \rightarrow Fe geschieht mit Hilfe der reduzierten Energie ϵ , durch die man eine Universalkurve erhalten kann. Die Abszisse ist dann:

$$\epsilon_{A \rightarrow B} = 32.5 \cdot 10^{-3} \cdot M_B / (M_A + M_B) \cdot E_i \cdot Z_A Z_B (Z_A^{2/3} + Z_B^{2/3})^{-1/2}. \quad (4.1.6)$$

M und Z sind Masse und Kernladungszahl der Projektile (Index A) bzw. der Targetatome (Index B) (/4.1/).

Bei einem anderen als dem System $H \rightarrow Fe$ wird deshalb die Energie E_i des Projektils mit dem Faktor $\epsilon_{cor} = \epsilon_{A \rightarrow B} / \epsilon_{H \rightarrow Fe}$ multipliziert, dann werden wieder die in Abbildung 10 auf Seite 104 enthaltenen Werte verwendet. Z.B. ist: $\epsilon_{cor} = 0.983$ für $D \rightarrow Fe$, bzw. $= 0.966$ für $T \rightarrow Fe$. Für $H \rightarrow Mo$ ergibt sich $\epsilon_{cor} = 0.539$.

Wie im Modell für Moleküle bleibt der Speziesindex unverändert, ebenso ist die Richtung des reflektierten Atoms cosinusverteilt, und die mittlere Anzahl der neuen Teilchen ist Eins, falls nicht Absorption eintritt. Lediglich wollte man induzierte Desorption oder durch heiße Neutralteilchen aus der Wand ausgelöste neutrale Verunreinigungsatome als zusätzliche Spezies ins Modell aufnehmen, wäre ein Wandprozeß eines Atoms mit Teilchenmultiplikation und eventuell neuem Speziesindex verbunden.

Folgende Modifikationen dieses Standardmodells sind derzeit durch Setzen von Inputparametern möglich:

1. $p_{sc,M}$ und $p_{sc,A}$ können mit einer Funktion $r_M(j)$ bzw. $r_A(j)$ multipliziert werden. j ist ein Index für eine Limiterfläche (3.6.9) oder ein Teilstück der Gefäßwand. Durch $r_M(j) = r_A(j) = 0$ können z.B. Gefäßöffnungen simuliert werden, während durch $0 < r_{M,A}(j) < 1$ einzelnen Teilen der Kammer Pumpeffektivitäten zugeordnet werden können.
2. Vor allem für kleine E_i (≤ 200 eV) sind die Werte von $p_{sc,A}(E_i)$ umstritten (/4.2/). Deshalb kann im Bereich $E_{min} < E_i < E_s$ die Funktion $p_{sc,A}(E_i)$ durch eine Parabel durch $p_{sc,A}(E_{min})$ und $p_{sc,A}(E_s)$ ersetzt werden. Für Energien E_i kleiner als E_{min} wird $p_{sc,A}(E_i)$ gleich Null gesetzt. E_{min} , E_s und $p_{sc,A}(E_{min})$ sind Inputparameter.
3. Die Absorptionswahrscheinlichkeit $1 - p_{sc,A}$ an der Wand wird auf den halben Wert reduziert: $p_{a,A} = (1 - p_{sc,A}) / 2$. Mit der gleichen Wahrscheinlichkeit $p_{sc,A \rightarrow M} = p_{a,A}$ ist das "reflektierte" Teilchen ein Molekül, dessen Speziesindex (bei mehreren Molekülsorten im Modell) aus einer vorgebbaren diskreten Verteilung gesammelt wird. Zählt man in der Teilchenbilanz Moleküle doppelt, so entspricht dieser Modifikation 100% Recycling an der Wand. Zusammen mit 1. können durch dieses Modell unterschiedliche Sättigungsgrade einzelner Gefäßbauteile und damit unterschiedliche Rekombinationsraten an der Wandoberfläche simuliert werden.

4. Sollen solche Effekte erfaßt werden, ohne daß Moleküle explizit im Modell enthalten sind, setzen wir $p_{a,A} = 0$, und mit der Wahrscheinlichkeit $1-p_{sc,A}$ startet ein Atom mit Franck-Condon-Energie E_{FC} (hier immer $E_{FC} = 3.5 \text{ eV}$).
5. Durch drei Parameter e_1 , e_2 und e_3 können Winkelabhängigkeiten ins Reflexionsmodell eingebracht werden. Dazu sei θ der Einfallswinkel ($\theta = 0$ entspricht senkrechtem Einfall). Ein lokales Koordinatensystem im Auftreffpunkt wird so gewählt, daß θ der Winkel gegen die positive x-Achse ist, und daß das einfliegende Teilchen keine Geschwindigkeitskomponente in y-Richtung hat. θ_r bzw. ϕ_r sei der Winkel gegen die negative x-Achse bzw. der Azimutwinkel, gemessen von der z-Achse aus, für das reflektierte Teilchen. Durch:

$$1-p_{sc,A}(E_i, \theta) = [1-p_{sc,A}(E_i, \theta=0)] \cdot \cos^{e_1}(\theta)$$

$$1-R_E(E_i, \theta) = [1-R_E(E_i, \theta=0)] \cdot \cos^{e_2}(\theta)$$

werden zunächst Teilchen- und Energiereflexionskoeffizient abhängig vom Einfallswinkel. Positive Werte e_1 und e_2 erhöhen diese Koeffizienten bei streifendem Einfall (dem in /0.7/ vorgeschlagenen Modell entspricht $e_1 = 1$, $e_2 = 0.5$).

Das andere Extrem zur bislang angenommenen diffusen Reflexion ist Spiegelreflexion. Theoretische Modelle, in denen ideale Oberflächenbedingungen angenommen wurden (/0.9/, /0.10/), um das weitere Verhalten in den Festkörper eingedrungener Wasserstoffatome zu simulieren, liefern dazwischen liegende Reflexionsmodelle, wobei reale Oberflächen auf Grund der Irregularitäten eine weitere Verschiebung in Richtung auf diffuse Reflexion bedeuten. Für die Richtungs cosinus c_x , c_y und c_z des reflektierten Teilchens setzen wir deshalb:

$$\begin{aligned} c_x &= \cos(\theta_r) \cdot f_1(\theta) && - \sin(\theta_r) \cdot \sin(\phi_r) \cdot f_2(\theta) \\ c_y &= \sin(\theta_r) \cdot \cos(\phi_r) \\ c_z &= \sin(\theta_r) \cdot \sin(\phi_r) \cdot f_1(\theta) + \cos(\theta_r) \cdot f_2(\theta) \end{aligned}$$

Dabei seien θ_r^* und ϕ_r aus dem Standardmodell (diffuse Reflexion) gewonnene Winkel, ferner:

$$\begin{aligned} \sin(\theta_r) &= f_1(\theta) \cdot \sin(\theta_r^*) \\ f_1(\theta) &= \cos^{e_3}(\theta) \\ f_2(\theta) &= [1-f_1(\theta) \cdot f_1(\theta)]^{1/2} \end{aligned}$$

Damit wird folgendes Reflexionsverhalten beschrieben: Für senkrechten Einfall oder für $e_3 = 0$ (allgemeiner: für $f_1 = 1$, also $f_2 = 0$) liegt wieder diffuse Reflexion vor. Andernfalls wächst der Anteil an gerichteter Reflexion mit dem Winkel θ , im Extremfall: $\theta = 90$ Grad liegt reine "Spiegelreflexion" vor.

Durch e_3 kann in gewissem Umfang gewählt werden, wie schnell mit wachsendem θ der Übergang von diffuser zu Spiegelreflexion erfolgt. $e_3 = 1$ entspricht dem in /0.8/ vorgeschlagenen Modell.

4.1.3 STOßPROZESSE

Der Ratenkoeffizient $s_k = \langle \sigma_k v \rangle$ für einen Stoßprozeß der durch den Index k bezeichneten Art eines Neutralteilchens mit der Geschwindigkeit v_n mit einer Plasmaspezies p (Elektronen oder Ionen), hier immer in cm^3/sec , ist gegeben durch:

$$s_k = \int d v_p f_p(v_p) \sigma_k(v_{\text{rel}}) v_{\text{rel}} \quad (4.1.7)$$

mit $v_{\text{rel}} = |v_p - v_n|$, f_p sei die Geschwindigkeitsverteilung der Plasmateilchen und σ_k der Querschnitt für den betrachteten Prozeß.

s_k hängt von v_n und über f_p vom Ort ab. $|v_p|^*$ sei die mittlere Geschwindigkeit der Plasmateilchen. Ist $|v_p|^* \gg |v_n|$, dann kann man die Abhängigkeit von v_n vernachlässigen (hier: bei allen Stoßprozessen von Neutralteilchen mit Elektronen angenommen), im Falle $|v_p|^* \ll |v_n|$ geht (4.1.7) über in: $s_k = \sigma_k(|v_n|) |v_n|$. Die Raten für den erstgenannten Fall und für Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung sowie die Querschnitte haben wir /4.13/, /4.14/ (Umladungsquerschnitt), /4.15/ (Molekülprozesse), /4.16/ (Strahlungsrekombination) und /4.17/ (Ionisation neutraler Verunreinigungen) entnommen.

Vor Beginn eines Simulationslaufes wird vom Code ein Plott der eingegebenen Geometrie (ein poloidaler Querschnitt an wählbarer toroidaler Posi-

tion) erstellt (z.B. Abbildung 7 auf Seite 93) sowie der vorhandenen Ratenkoeffizienten (Abbildung 11) Die Abszisse ist eine Energieskala (eV). Abbildung 11 ist im einzelnen wie folgt zu interpretieren:

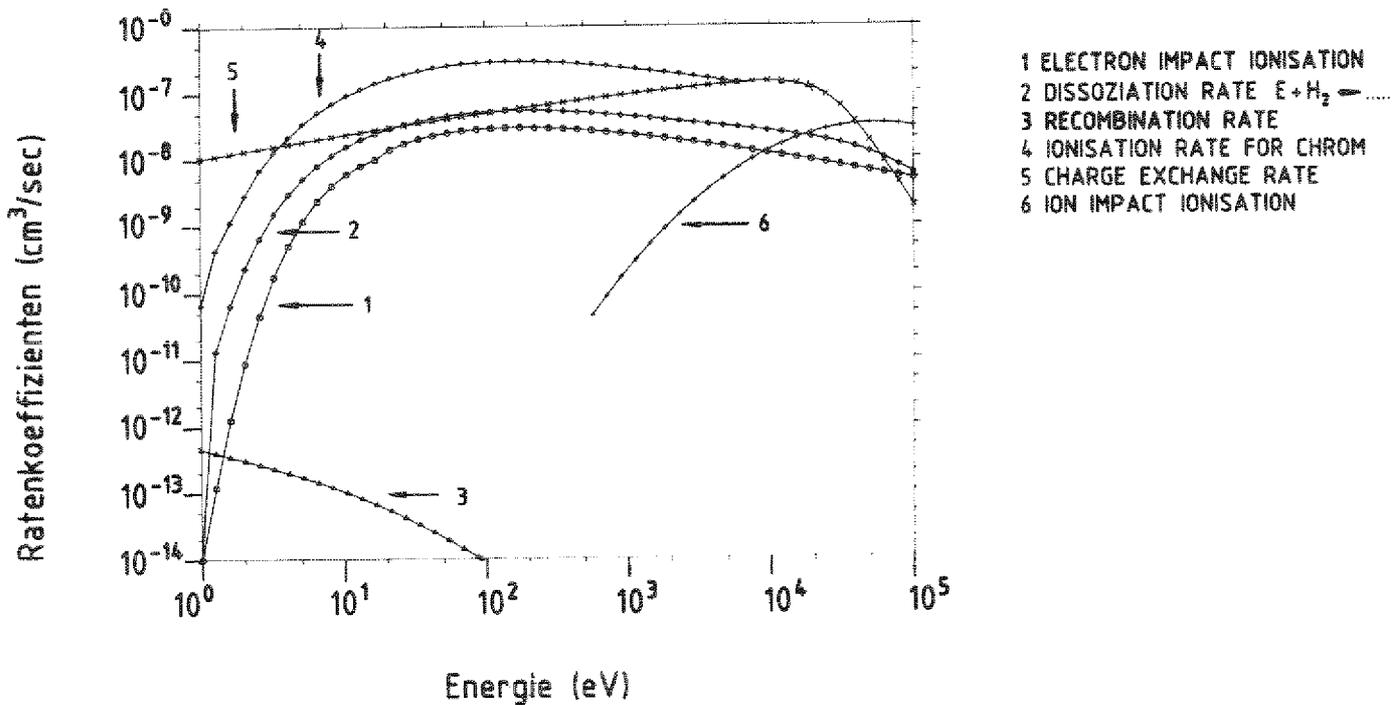
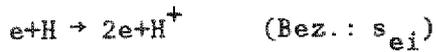


Abbildung 11. Im Monte-Carlo-Code verwendete Stoßraten: $\langle \sigma \cdot v \rangle$

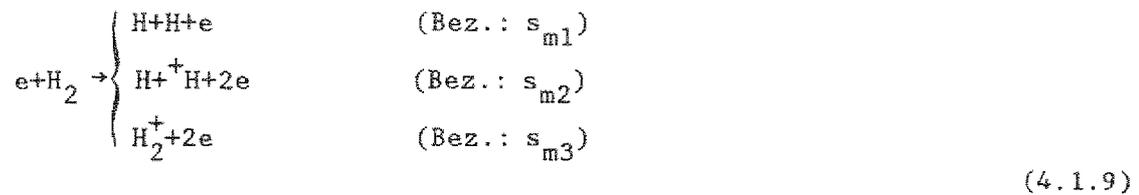
1. Elektronenstoßionisation:



(4.1.8)

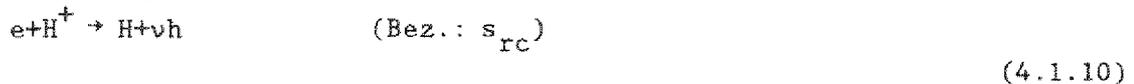
Die Abszisse ist die Elektronentemperatur, wie auch bei den folgenden Prozessen.

2. Dissoziation durch Elektronenstoß:



Aufgetragen ist: $s_{m1}+s_{m2}+s_{m3}$.

3. Strahlungsrekombination:



s_{rc} dient nur zur Definition einer Quellenverteilungsdichte, geht also nicht in den makroskopischen Querschnitt Σ_{tot} ein.

4. Ionisation von neutralem Chrom



5. Ladungsaustausch



Wegen der nur sehr schwachen Energieabhängigkeit des Querschnitts verwenden wir anstatt (4.1.7) zumeist die gute Näherung

$$s_{cx} = \sigma_{cx}(v_{rel}) \cdot v_{rel} \quad \text{mit } v_{rel} = (8kT_i / \pi m_i + |\mathbf{v}_n|^2)^{1/2}$$

(kT_i : Ionentemperatur, m_i : Ionenmasse)

Die Energiewerte in Abbildung 11 auf Seite 109 sind kT_i , s_{cx} ist aufgetragen für $\mathbf{v}_n = \mathbf{0}$, $m_i =$ Protonenmasse.

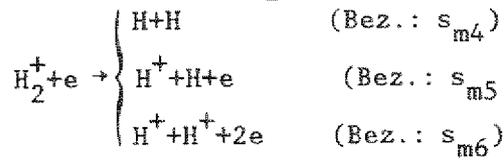
6. Ionenstoßionisation



Aufgetragen ist ein nach (4.1.7) berechneter Koeffizient mit maxwellverteilten Ionengeschwindigkeiten für $\mathbf{v}_n = \mathbf{0}$ über der Ionentemperatur.

Für den zusammengesetzten Dissoziationsprozeß muß noch die mittlere Anzahl von Folgeteilchen angegeben werden. Dazu werden drei weitere Raten verwendet:

7. Dissoziation von H_2^+



(4.1.14)

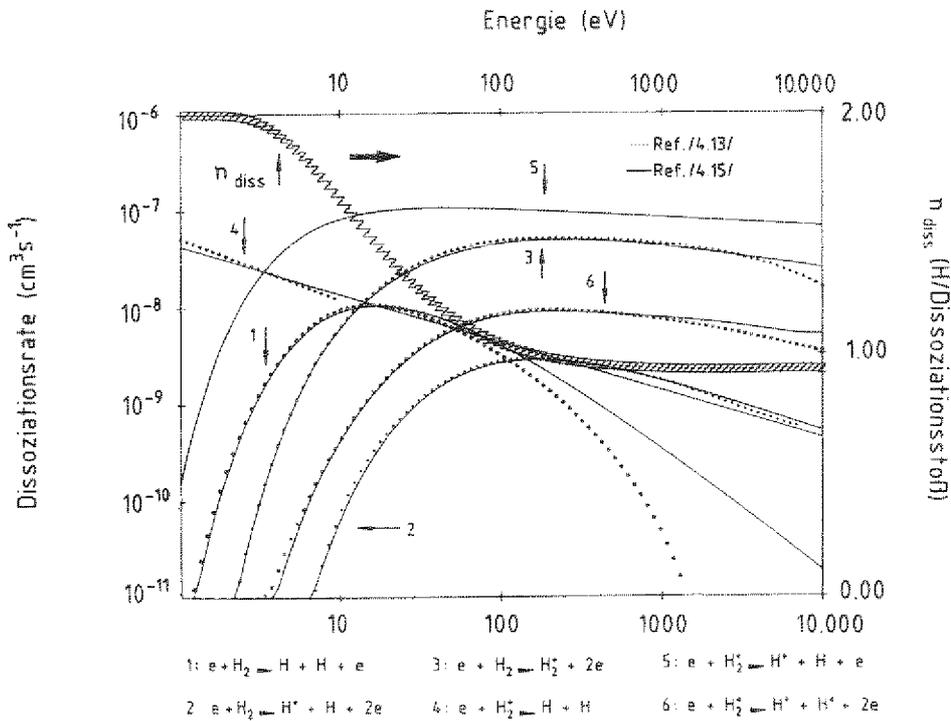


Abbildung 12. Molekülprozesse: Raten $\langle\sigma \cdot v\rangle$ und mittlere Anzahl neutraler Atome nach einem Dissoziationsereignis n_{diss}

In Abbildung 12 sind die Ratenkoeffizienten s_{m1} - s_{m6} im einzelnen aufgetragen, aus Ref. /4.13/ und Ref. /4.15/. Die Übereinstimmung ist im hier interessierenden Temperaturbereich $kT_e < 50$ eV sehr gut. Die mittlere Anzahl der entstehenden neutralen Atome ist

$$n_{diss} = 1/s_{ms} \cdot (2 \cdot s_{m1} + s_{m2} + \alpha \cdot s_{m3}) \quad (4.1.15)$$

mit

$$s_{ms} = s_{m1} + s_{m2} + s_{m3} \quad \text{und} \quad \alpha = (2 \cdot s_{m4} + s_{m5}) / (s_{m4} + s_{m5} + s_{m6}),$$

bezogen auf ein Dissoziationsereigniss. (Nur s_{ms} und n_{diss} gehen in die Rechnung ein.)

Zur vollständigen Festlegung des Stoßkerns C muß noch die Geschwindigkeitsverteilung w des nach dem Stoß weiterverfolgten Teilchens angegeben werden. Nach einem Dissoziationsstoß verwenden wir eine isotrope Richtungsverteilung, bei fester Energie 3.5 eV. Die Geschwindigkeitsverteilung des neutralen Teilchens nach einem Ladungsaustauschstoß ist diejenige der Ionen am Stoßort (streng genommen ist diese noch mit der hier jedoch nur sehr schwach energieabhängigen Stoßwahrscheinlichkeit zu falten, siehe unten), in allen Simulationsbeispielen in dieser Arbeit wurde eine Maxwellverteilung angenommen. Mit einigen Bemerkungen sei die Konkretisierung des Stoßkernes C aus der Transportgleichung abgeschlossen.

1. Die makroskopischen Querschnitte Σ_k berechnen sich zu:

$$\Sigma_k(i, r, v_n) = s_k(i, r, v_n) \cdot n_p(r) / |v_n| \quad (4.1.16)$$

$n_p(r)$ ist dabei die Teilchendichte der Stoßpartner beim Stoßprozeß der Art k.

2. Die freie Weglänge $\lambda_k = 1/\Sigma_k$ (cm) für H_2^+ -Ionen mit einer 300 Kelvin entsprechenden Energie bei $n_e = 10^{13}$ (cm⁻³) ergibt sich zu 0.3 cm bei einer Elektronentemperatur von $kT_e = 10$ eV und reduziert sich zu 0.16 cm bei $kT_e = 20$ eV. Aus diesem Grund haben wir die neutralen Dissoziationsprodukte der Prozesse $H_2^+ + e \rightarrow \dots$ (4.1.14) direkt der Reaktion $H_2 + e \rightarrow \dots$ zugeschlagen.
3. Selbst bei geringen Dichten und kleinen Temperaturen wie im Datensatz U werden praktisch alle Moleküle in der äußersten Randschicht dissoziiert (siehe Kapitel 4.2). Noch kürzer (siehe Abbildung 11 auf Seite 109) sind die Reichweiten neutraler Verunreinigungen, exemplarisch sind die Raten für Chrom gezeigt. Anders als die Moleküle liefern sie aber kein neutrales Teilchen nach dem Stoß, sie sind deshalb in dieser Arbeit in den simulierten Modellen nicht enthalten.
4. Nur bei Simulationen mit dem Datensatz J war der Prozeß 4.1.13 (Ionenstoßionisation) enthalten. Erst bei relativen Energien der Stoßpartner oberhalb 2 keV gewinnt dieser Prozeß an Bedeutung.

5. Bei genauerer Behandlung müßte die Geschwindigkeit des Neutralteilchens nach einem Umladungsstoß aus der Dichte

$$w_{cx}(\mathbf{v}) = f_p(\mathbf{v}) \cdot \sigma_{cx}(v_{rel}) \cdot v_{rel} / s_{cx}$$

mit s_{cx} gem. (4.1.7) und $v_{rel} = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_n|$ gesammelt werden. Sammelt man statt dessen aus $f_p(\mathbf{v})$, wie es oben vereinbart wurde, ist bei jedem Umladungsstoß während eines "random walks" in der Funktion W von (3.4.3) ein Faktor $\sigma_{cx}(v_{rel}) \cdot v_{rel} / s_{cx}$ anzubringen.

Diese Faktoren haben jedoch (siehe Abbildung 13 auf Seite 114) praktisch den Wert Eins, so daß wir bislang diese Gewichtskorrektur gegenüber den größeren Unsicherheiten im physikalischen Modell (ca. $\pm 20\%$ für die Stoßraten, hinzu kommen je nach Modell unterschiedliche statistische Schwankungen, etwa $\pm 10\%$) vernachlässigt haben.

Abbildung 13 auf Seite 114 zeigt die Ratenkoeffizienten für Ladungsaustausch, einmal berechnet durch numerische Integration von (4.1.7) und einmal (die Kurven ohne Symbol) nach der o.a. Näherung. Der Parameter E ist die kinetische Energie des neutralen H-Atoms. Die in Abbildung 14 auf Seite 114 gezeigten mittleren freien Weglängen sind daraus für eine Ionendichte $n_i = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ berechnet.

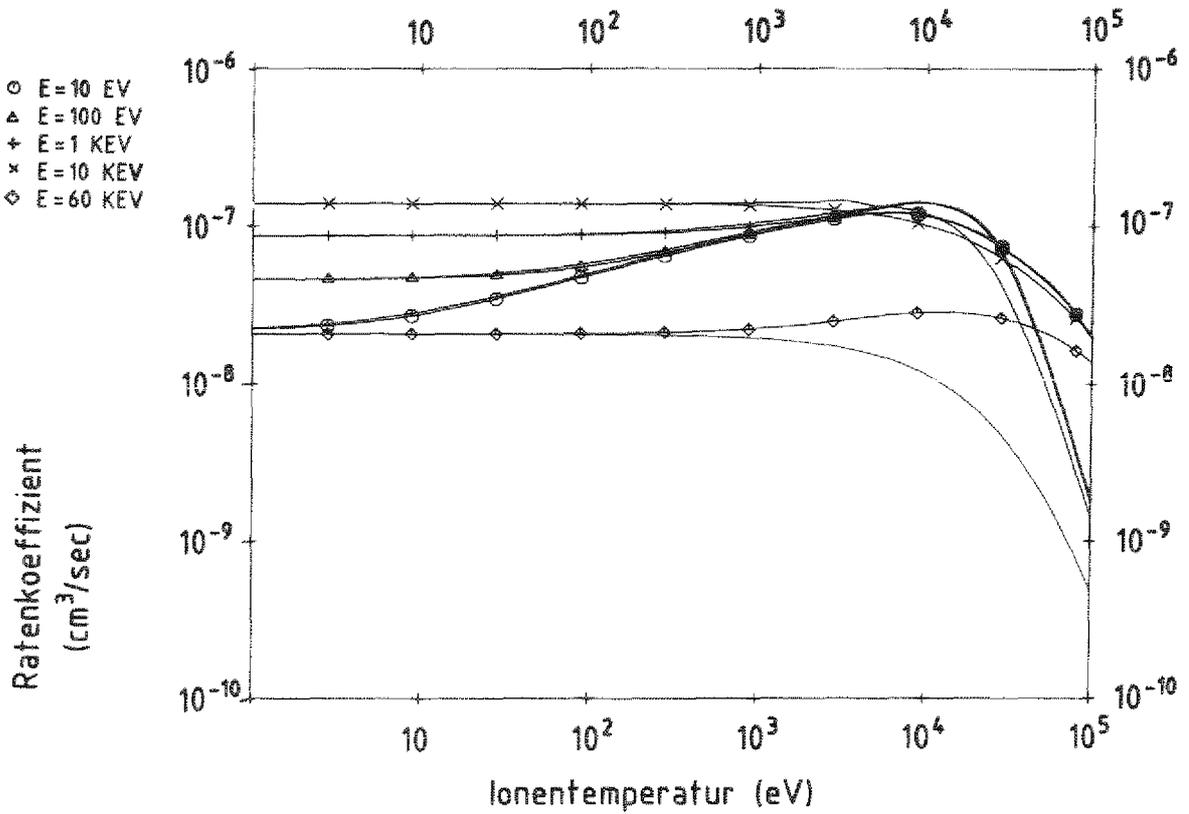


Abbildung 13. Ratenkoeffizienten für Umladung: $\langle \sigma \cdot v \rangle_{cx}$: integriert gem. (4.1.7) und Näherung gem. (4.1.12)

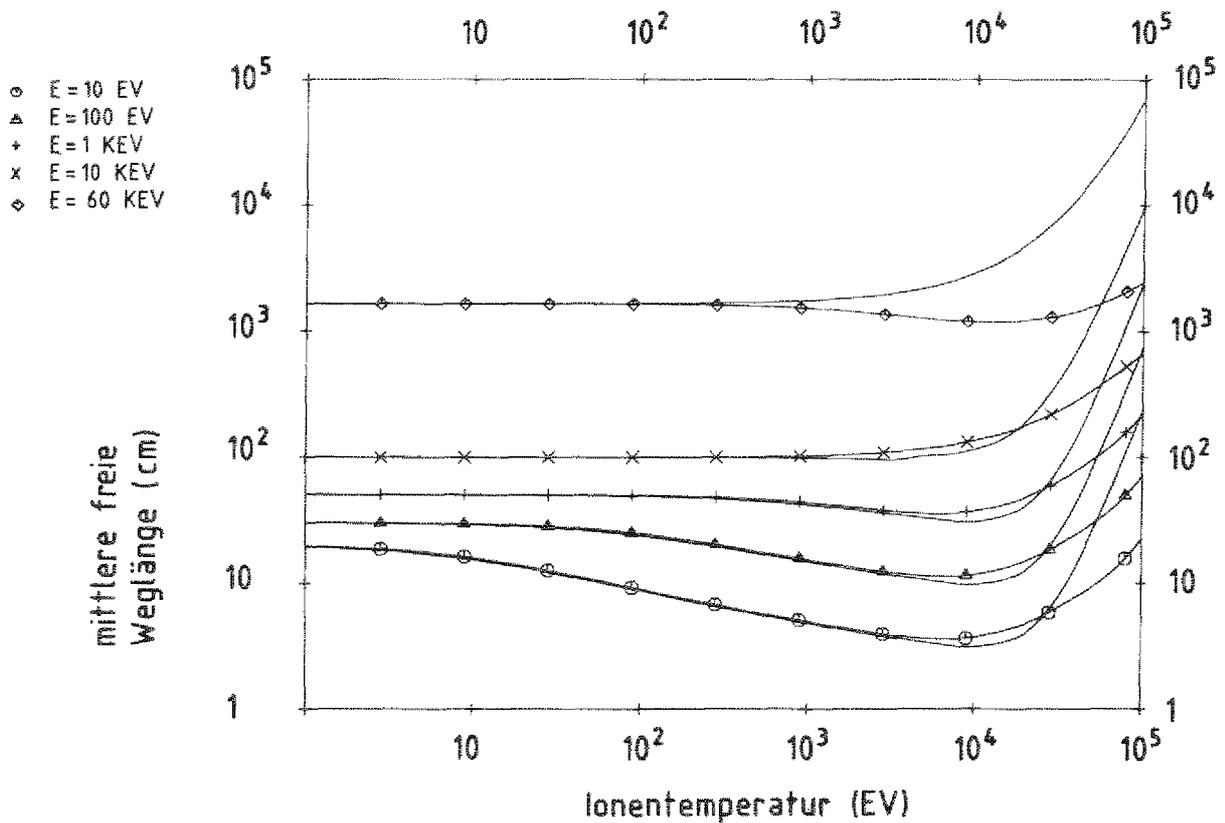


Abbildung 14. Mittlere freie Weglängen für Umladung ($n = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$)

4.2 UNITOR, TOROIDALER LIMITER

Ein poloidaler Querschnitt der den Simulationsbeispielen mit dem t Datensatz U zu Grunde liegenden Geometrie ist schon in Kapitel 3.6, Abbildung 7 auf Seite 93 gezeigt. Limiterflächen werden vom Code mit stärkerer Strichdicke gezeichnet, hier haben wir auf dem Stück $-4 < y < 4$ des rechten äußeren Gefäßrandes eine Quellenverteilungsdichte definiert. Die Flußflächen approximieren wir durch ein Netz konzentrischer Kreise.

Für den Tokamak UNITOR, an den der Datensatz U angepaßt ist, wurde in /0.7/ ein Monte-Carlo-Code entwickelt. Dort sind auch Vergleiche von berechneten und gemessenen Werten angegeben. Für Details der folgenden Modellannahmen beziehen wir uns darauf und auf /4.19/.

Die freie Weglänge für Atome (loc. cit.) ist nicht klein gegen die Gefäßdimensionen (≈ 100 cm am Rand, ≈ 5 cm im Plasmazentrum). Deshalb haben wir zur Berücksichtigung toroidaler Effekte das Netz $\Sigma_{c,p}$ um die beiden Flächen f_o und f_u (siehe (3.6.7)) erweitert.

Die y-Koordinate y_1 des am Limiter startenden Teilchens sammeln wir gemäß:

$$y_1 = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_8 - 4, \quad \xi_i \text{ gleichverteilt auf } [0,1], \quad i=1,2,\dots,8$$

(Die Verteilung von y_1 ähnelt einer Gaußverteilung um 0, die Varianz ist 2.66, sie fällt aber bei ± 4 genau auf Null ab.) Alle Teilchenflüsse werden im Ampere angegeben, indem wir jedem Teilchen formal eine Elementarladung zuordnen. Die Ergebnisse in diesem Abschnitt sind auf eine Quellstärke von 320 A am Limiter normiert (entsprechend $2 \cdot 10^{18}$ Teilchen/cm²/sec bei einer effektiven Limiterfläche von 1000 cm²).

Zur Festlegung der Geschwindigkeit und der Spezies des startenden Teilchens (H oder H₂) sammeln wir eine Ionengeschwindigkeit aus einer halben (auf den Limiter gerichteten) Maxwellverteilung mit $kT_i = 5$ eV.

Dann wenden wir das Standardreflexionsmodell (4.1.2) an, mit der Modifikation 2 ($E_s = 300$ eV, $E_{\min} = 0$, $p_{sc,A}(0) = 0.5$) und 3. Die Modifikation 3

(100% Recycling bei doppelt gezählten Molekülen) ist jedoch auf den Limiterebereich ($x=10$ cm, $-4 < y < 4$ cm) beschränkt, die übrigen Teile des Gefäßes wirken also wie eine Pumpe (wegen der dort kleineren Ionenflüsse: $1-2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ sec}^{-1}$ und des darum geringeren Sättigungsgrades der Wand).

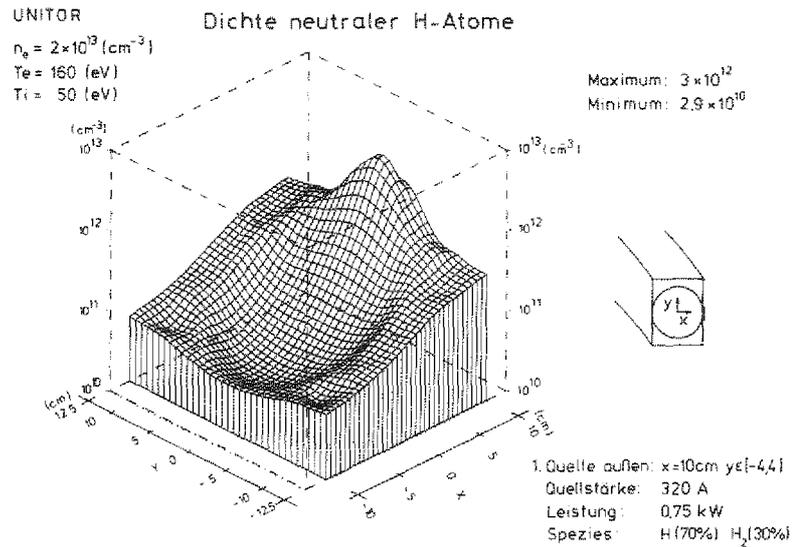


Abbildung 15. Dichte neutraler H-Atome: Radiale und poloidale Verteilung bei reiner Limitereinströmung von der Torusaußenseite

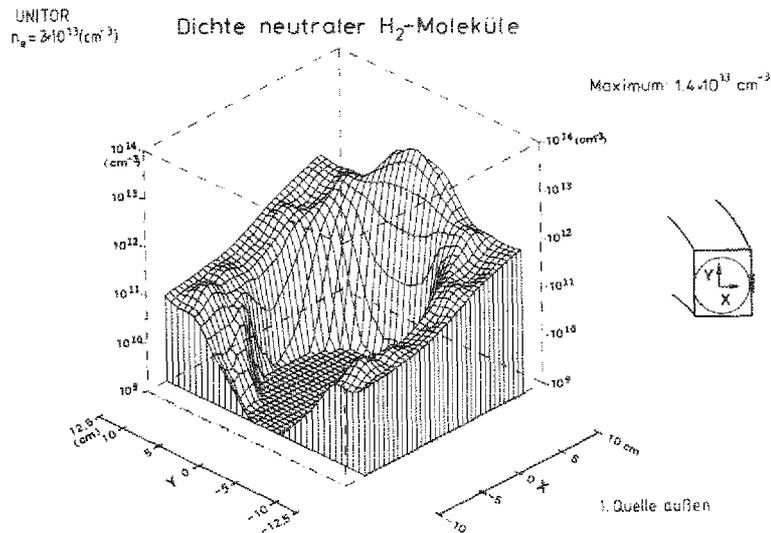


Abbildung 16. Dichte neutraler H_2 -Moleküle: Radiale und poloidale Verteilung bei reiner Limitereinströmung von der Torusaußenseite (vergl. Abbildung 15).

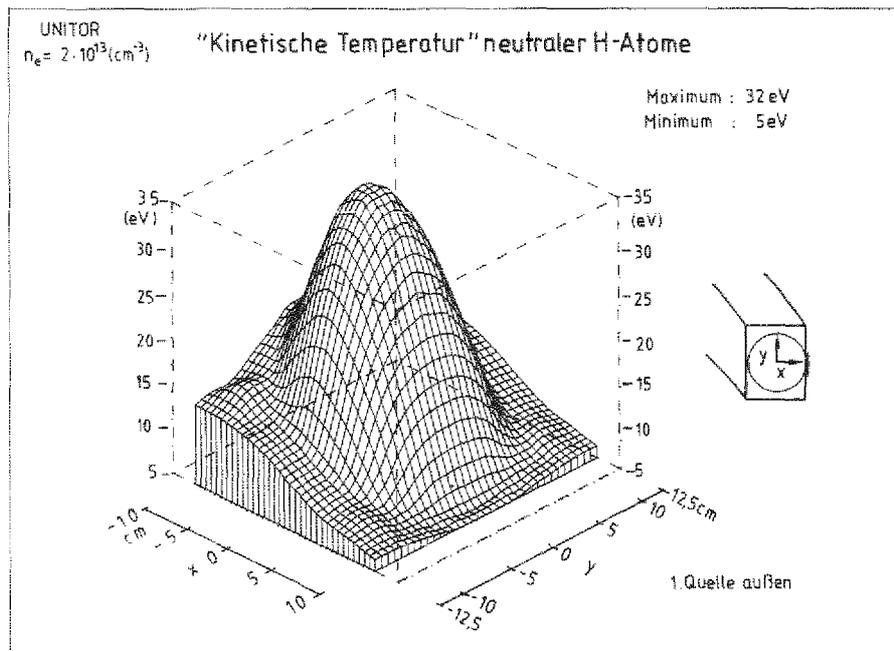


Abbildung 17. "Kinetische Temperatur" neutraler H-Atome: Radiale und poloidale Verteilung bei reiner Limitereinströmung von der Torusaußenseite (vergl. Abbildung 15 auf Seite 116).

Die Abbildung 15 auf Seite 116, Abbildung 16 auf Seite 116 und Abbildung 17 zeigen die bei diesem Modell sich mit den Plasmaparametern gem. Tab. 4.1.1 einstellenden Dichteverteilungen neutralen Wasserstoffs, neutraler H_2 -Moleküle und die kinetische Temperatur der H-Atome. (Die Grundfläche der gezeigten Quader ist jeweils ein ganzer poloidaler Querschnitt, hier also ein Rechteck $20 \times 25 \text{ cm}^2$.)

Die H-Dichte fällt um zwei Größenordnungen vom Maximum am Limiter ($\approx 3 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$) auf den Minimalwert bei $x=-5, y=0 \text{ cm}$. Der Dichteanstieg von dort aus auch in Richtung auf Teile des Gefäßes, die effektiv eine Pumpe für neutrale Atome darstellen, liegt an dem mehrfachen Pendeln der H-Atome zwischen Gefäß und Plasma und der kleineren mittleren Energie dort.

Toroidale Effekte haben auf die gezeigten Profile keinen Einfluß, wie Testläufe mit identischem Modell aber Zylinderapproximation zeigten. Die Asymmetrie der Profile ist auf die unsymmetrische Quellenverteilung (hier: nur auf der Außenseite) zurückzuführen. Übereinstimmend mit /0.7/

ergibt sich aber eine Verlagerung der Teilchenflüsse auf die äußeren Teile des Gefäßes durch die toroidale Geometrie (von 215 A außen ($x=10$ cm) und 29 A innen ($x=-10$ cm) in Zylindergeometrie zu 263 A außen und nur 20 A innen bei Berücksichtigung toroidaler Effekte). Dieser Effekt tritt auf, weil die neutralen Teilchen das Plasma unter einem kleineren Raumwinkel sehen, wenn sie sich in der äußeren Torushälfte befinden verglichen mit den Teilchen auf der Innenseite. Er verstärkt sich, wenn auch auf der Torusinnenseite Quellen für Neutralgas angesetzt werden.

Weitere Vergleichsläufe mit der Modifikation 4 des Reflexionsmodells am Limiter (anstatt 3), d.h. ohne explizite Berücksichtigung der Moleküle ergeben praktisch gleiche Resultate, was die Form der Profile anbetrifft. Insbesondere bleibt die Verschiebung von Temperaturmaximum und Dichteminimum der H-Atome zur Torusinnenseite erhalten. Dieses Modell (Moleküle nur implizit berücksichtigt durch 100% Recycling am Limiter, mit direkt entstehenden Franck-Condon Neutralen (3.5 eV)) bezeichnen wir als U2, das oben angegebene als U1.

Als weitere Modifikation (U3) von U1 haben wir noch eine zweite, gleichmäßig über die restliche Gefäßoberfläche verteilte Quelle überlagert (reine H-Einströmung, H_2 -Moleküle können beim Berechnen der zu dieser Quelle gehörenden Profile nur entstehen, wenn neutrale H-Atome im ("gesättigten") Limiterbereich auf die Wand treffen. Die Quellstärke beträgt hier 480 A, das entspricht $2 \cdot 10^{17}$ Teilchen/cm²/sec.

Abbildung 18 auf Seite 119 zeigt die nun resultierende H-Dichte. Die starke Dominanz von Wandeffekten (Quellen und Reflexion) für das Neutralgasverhalten bis ins Plasmazentrum, die typisch für kleine Tokamaks ist, wird hier durch eine einigermaßen gleichförmige Quellendichte verdeckt, auch das Temperaturprofil ist nun gut zentriert.

Zusätzlich zur zweiten Quelle lag bei Abbildung 18 auf Seite 119 und Abbildung 19 auf Seite 119 (Modell U4) noch eine gegenüber U3 erhöhte Plasmadichte vor, nämlich $n_i = n_e = 5 \cdot 10^{13}$ cm⁻³ im Zentrum ($\rho=0$), dann $2.5 \cdot 10^{13}$ bei $\rho=s$ und $1 \cdot 10^{13}$ bei $\rho=a$. Die Profilparameter sowie die Werte von s und a sind wie in Tab. 4.1.1 angegeben geblieben.

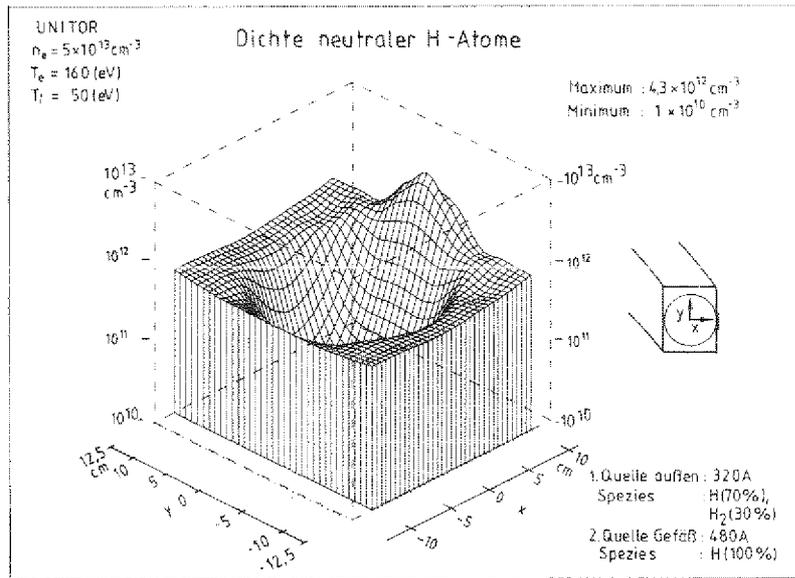


Abbildung 18. Dichte neutraler H-Atome: Radiale und poloidale Verteilung (vergl. Abbildung 15 auf Seite 116, hier: höhere Plasmadichte und zusätzliche Quelle an der restlichen Gefäßoberfläche).

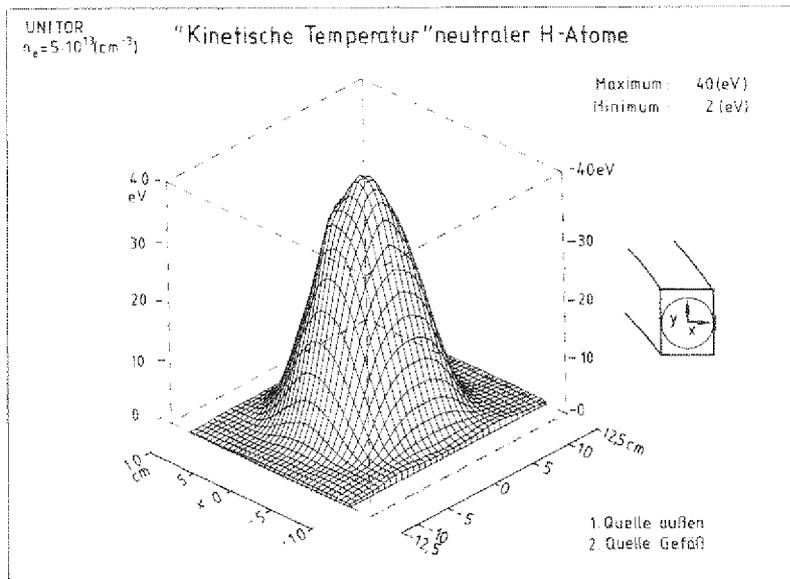


Abbildung 19. "Kinetische Temperatur" neutraler H-Atome: Radiale und poloidale Verteilung (vergl. Abbildung 17 auf Seite 117, hier: höhere Plasmadichte und zusätzliche Quelle an der restlichen Gefäßoberfläche).

Die Konsequenz (wegen höherer Stoßdichte) ist, daß die Neutralgas"temperatur" nun 80% (90% in /0.7/, dieser Wert ergab sich bei unseren Rechnungen ebenfalls, wenn wir durch Wahl anderer Profilparameter ($p=4$, $q=2$) die Plasmaparameter besser an die in /0.7/ verwendeten an gleichen) gegenüber 60% (60% in /0.7/) der maximalen Ionentemperatur (hier 50 eV) erreicht.

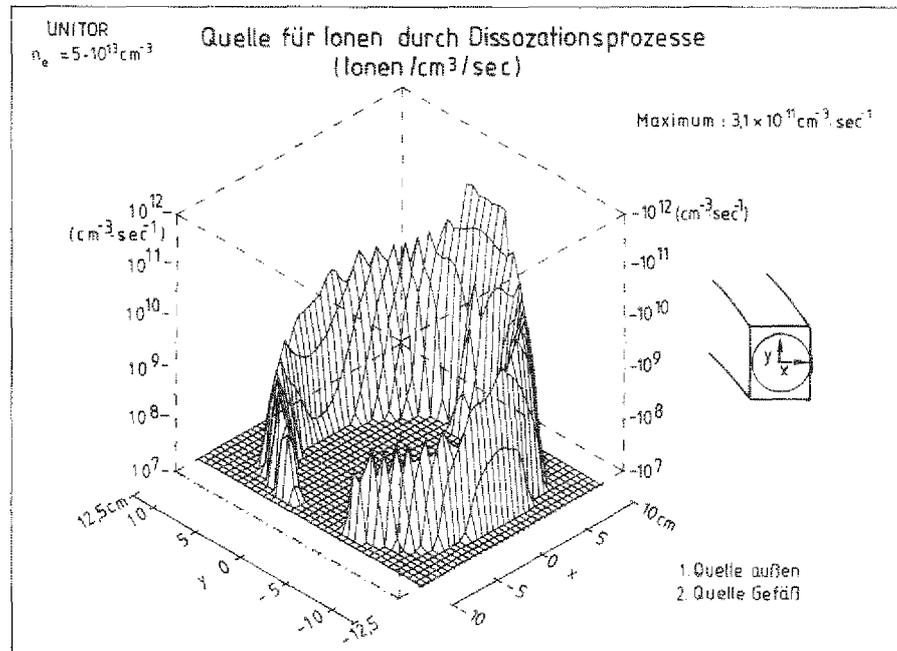


Abbildung 20. Dissoziationsstoßdichte: Radiale und poloidale Verteilung der Quelle für die Ionenteilchenbilanz durch Dissoziation neutraler H_2 -Moleküle, insgesamt: 63 A

In Abbildung 20 ist noch die poloidale Verteilung des von Dissoziationsprozessen herrührenden Quellterms (H^+ -Ionen pro cm^3 und pro sec) gezeigt. Wie auch schon Abbildung 16 auf Seite 116 abzulesen war, finden fast alle Dissoziationsprozesse in einem schmalen Plasmaring, etwa bei $6 < r < 8$ cm, statt, also im Bereich $10 < kT_e < 40$ eV. Die Moleküldichte fällt hier auf 3 cm in radialer Richtung um 8 Größenordnungen. (Die Moleküldichten sind trotzdem auch innerhalb dieses Ringes mit fast gleicher statistischer Genauigkeit berechnet wie vor der Quelle, was mit der Schätzfunktion X_{con} aus Kap. 3.3, Glg. 3.3.68, möglich ist.)

Zum Vergleich mit den Simulationsergebnissen bei größeren Tokamaks (Kapitel 4.3, 4.4 und 4.5) in Hinblick auf die dort bereits vorliegende Trennung des Kernplasmas von der Randschicht (d.h. Konzentration fast aller atomaren Prozesse in einer äußeren Zone) zeigt Abbildung 21 die über die poloidale Koordinate gemittelten Quellterme (für Modell U3), die auch in dieser Form in 1-D-Transportcodes eingehen.

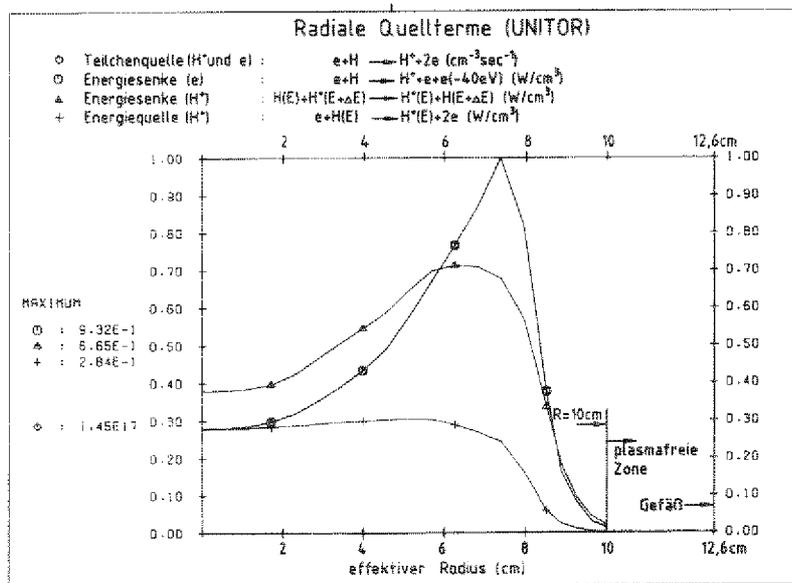


Abbildung 21. Quellterme für Bilanzgleichungen: Radiale Verteilung der durch Plasma-Neutralgas-Wechselwirkung bewirkten Flüsse

Die Korrektheit der Quellterme für die Teilchenbilanzgleichungen wurde (neben der globalen Bilanz) überprüft, indem zusätzlich der radiale Fluß von Neutralteilchen durch Flächen $r=\text{const.}$ berechnet wurde (mit $\int g(x)dl \sim r_2 - r_1$ in Glg. 3.3.71, r_1 und r_2 sind die radialen Abstände vom Zentrum beim Eintritt bzw. beim Verlassen einer Zelle). Die radialen Molekülflüsse mußten aus ökonomischen Gründen mit einer Schätzfunktion berechnet werden, die zwischen X_{con} und X (Glg. 3.3.68 und 3.3.71) liegt, was die Glattheit anbetrifft. (X wurde hinsichtlich einer σ -Algebra geglättet, hinsichtlich der X_{con} noch nicht meßbar ist.) Die exakte Übereinstimmung dieser radialen Flüsse (Moleküle doppelt gezählt) durch Flächen $r=\text{const.}$ mit den innerhalb dieser Flächen aufintegrierten

Teilchensenken bzw. -Quellen (bis auf $\leq 1\%$) ist ein Hinweis einerseits für die Erwartungstreue der durch Glätten bzw. Randomisieren gem. 3.3.70 abgeleiteten Schätzfunktionen als auch für die Korrektheit der Quellterme.

Einige über das ganze Torusvolumen integrierte Flüsse, wie sie bei den Simulationen U3 und U4 auftraten ($n_e(0)=2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ bzw. $n_e(0)=5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$) sind im folgenden zu einer Bilanz zusammengefaßt (der erste Summand bezieht sich auf die Limitereinströmung, der zweite auf die gleichförmige Quelle auf der restlichen Gefäßoberfläche):

Tabelle 4.2.1 Teilchenflüsse (Amp)		U3		U4	
Quelle	H	214 + 480 =	694	214 + 480 =	694
	H ₂	106 + 0 =	106	106 + 0 =	106
Reflektierte Neutralteilchen	H	204 + 255 =	459	206 + 238 =	444
	H ₂	62 + 14 =	76	68 + 10 =	78
Quelle für H durch Dissoziation von H ₂		244 + 19 =	263	286 + 16 =	302
H ₂ -Verluste durch Dissoziation		-151 - 12 =	-163	-163 - 9 =	-172
H-Verluste durch Ionisation		-226 - 232 =	-458	-272 - 251 =	-523
Teilchenflüsse auf das Gefäß	H	-422 - 516 =	-938	-418 - 482 =	-900
	H ₂	- 18 - 2 =	- 20	- 10 - 1 =	- 11
Energieflüsse (kW) (nur H-Atome)					
Quelle		0.73+ 1.65=	2.38	0.74+ 1.68=	2.42
Ladungsaustausch		6.96+ 7.65=	14.61	6.40+ 6.05=	12.45
Dissoziation		0.85+ 0.07=	0.92	1.00+ 0.05=	1.05
Reflektierte H-Atome		2.55+ 2.68=	5.23	1.87+ 1.76=	3.63
Energieflüsse auf das Gefäß		-8.19- 8.43=	-16.62	-5.71- 5.43=	-11.14
Energieverluste durch Ionisation		-3.41- 3.58=	-6.99	-4.31- 4.03=	- 8.14

Als Recyclingfaktor Rec wird in /0.7/ der Quotient aus der Anzahl ionisierter H-Atome zur Quellstärke definiert. Wir zählen die oben genannten Molekülflüsse doppelt und schlagen der Ionisation den zusätzlichen Teilchenverlust (für die Neutralteilchenbilanz) durch Dissoziation

zu, dann ergibt sich hier der Wert $\text{Rec}=0.67$ für U1, $\text{Rec}=0.58$ für U3 (wegen des relativ geringeren Anteils an Reflexion im "gesättigten" Limiterbereich durch die zusätzliche zweite Quelle), ca. 0.73 in /0.7/. Bei den Rechnungen mit höherer Plasmadichte (U4) finden wir $\text{Rec}=0.75$ bzw. $\text{Rec}=0.66$ nach Überlagerung der zweiten Quelle ($\text{Rec}=0.8$ in /0.7/).

Trotz der kleineren Flüsse sind die über den ganzen Torus gemittelten Dichten für Moleküle mit denen neutraler H-Atome vergleichbar, nämlich $4.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ und $2.8 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ für H bzw. H_2 bei U3 und (wegen höherer Ionisationsverluste geringer) $3.8 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ bzw. $1.9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ bei U4. Ohne die reine H-Einströmung vom Gefäßrand, also nur mit der Limiterquelle (U1) ist die Moleküldichte sogar größer: $1.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ für H und $2.6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ für H_2 .

Die Energiebilanz zeigt, daß die in guter Übereinstimmung mit /0.7/ beobachtete Zunahme der mittleren Neutralteilchenenergie bei höherer Plasmadichte nicht mit größeren Energieverlusten durch Umladung auf Plasmaseite verbunden ist, sondern an der geringeren Transparenz des Plasmas für Neutralteilchen und damit verbunden geringerer Energiedeposition auf der Wand liegt.

Zum Vergleich mit größeren Tokamaks sei noch eine "Teilcheneinschlußzeit für Teilchen innerhalb r" (r ist der kleine Radius) angegeben, berechnet als Quotient von Anzahl der Ionen innerhalb r und radialem Fluß von Neutralteilchen (Moleküle doppelt gezählt) durch $r=\text{const}$. Für diese Zeiten ergibt Modell U3 die Werte $\tau_{r=10}=0.22 \text{ msec}$, $\tau_{r=5}=0.45 \text{ msec}$ und $\tau_{r=2}=0.69 \text{ msec}$.

Die Absolutwerte skalieren über die Flüsse umgekehrt proportional mit der Quellstärke. Letztere ist hier nur angesetzt und vermutlich eher zu hoch, zumal bedingt durch unser Reflexionsmodell für Ionen am Limiter ein Teil der $2 \cdot 10^{21}$ Teilchen/sec molekular vorliegt (ca. 30%).

Entsprechende Rechnungen mit ASDEX-Parametern (siehe Kap. 4.3) ergaben eine Zunahme der Einschlußzeiten für Teilchen innerhalb r von außen nach innen auf den 33-fachen Wert, bei Plasmadichten um 10^{14} cm^{-3} im Zentrum sogar eine Zunahme um bis zu drei Größenordnungen, was charakteristisch

für ein von der Randschicht (schlechter Einschluss) getrenntes Kernplasma (guter Einschluss) ist.

Nicht direkt mit Hilfe des Monte-Carlo-Algorithmus, aber unter Benutzung der damit erhaltenen Neutralgasdichten im Grundzustand wurde unter Verwendung eines Stoß-Strahlungsmodells /4.20/ auch die Dichteverteilung der H-Atome im ersten angeregten Niveau bestimmt, hier in Abbildung 22 exemplarisch für das Simulationsmodell U3 wiedergegeben. Der dazu verwendete Programmteil wurde von C. Gillet (Univ. Düsseldorf) geschrieben. Er ist z.B. auch in /0.7/ ausführlich beschrieben.

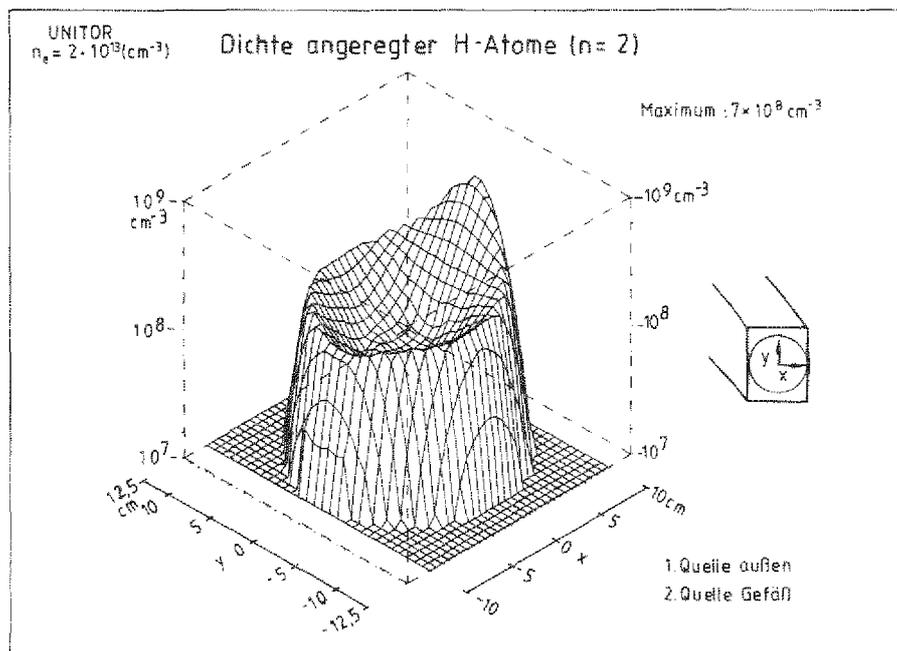


Abbildung 22. Dichte angeregter ($n=2$) H-Atome: Radiale und poloidale Verteilung, gemäß Stoß-Strahlungsmodell /4.20/ (vergl. Abbildung 18 auf Seite 119).

Das Profil ist durch die Wahl der Quellen für Neutralteilchen im Ortsraum und durch die Quellstärken stark variierbar und kann so auch mit gemessenen H_{α} -Linienintensitäten und Linienprofilen (falls zusätzlich die Verteilungsfunktion der Neutralteilchengeschwindigkeiten in Richtung des Sehstrahls berechnet wird, und wenn Strahlungs- und Dreierstoßrekombination ("Kopplung an das Kontinuum") nur

vernachlässigbare Beiträge zu den betrachteten Dichten in angeregten Niveaus ($n=2$, $n=3$) liefern) in Einklang gebracht werden (loc. cit.).

Der Unterschied des in Abbildung 22 auf Seite 124 gezeigten Profils zu den in /0.7/ angegebenen beruht auf der dort auch auf der Torusinnenseite in der Äquatorialebene ($y=0$) angesetzten gleichstarken Limitereinströmung wie von der Außenseite, ferner auf der dort mit nur 40 A viel kleiner angesetzten Quellstärke.

4.3 ASDEX, POLOIDALER LIMITER

Den Rechnungen mit dem Datensatz A (aus Tab. 4.1.1) liegen im Bereich $0 < r < 40$ cm an ASDEX gemessene Plasmaparameter (siehe Abbildung 23) zu Grunde.

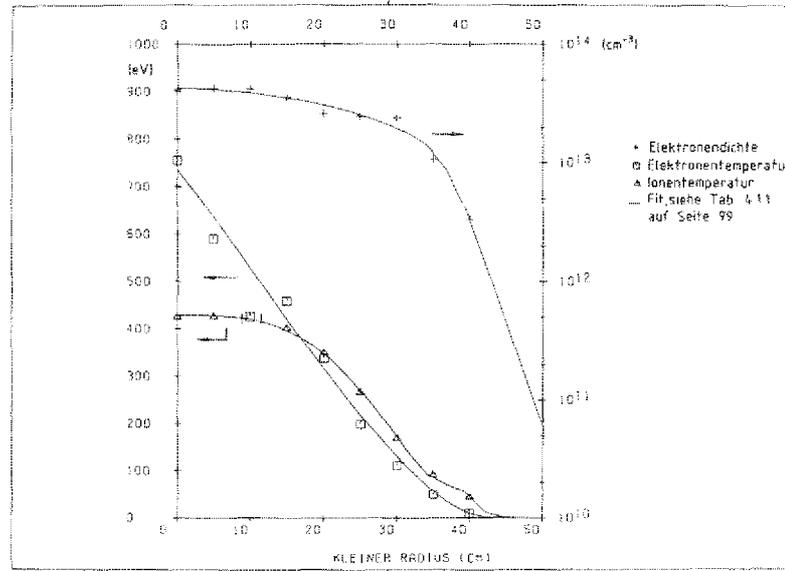


Abbildung 23. Plasmaparameter im Datensatz A: Experimentelle Werte und Profile gem. Tabelle 4.1.1

In unserem Modell fällt das Plasma dann von der bei $r=40$ cm angenommenen Limiterinnenkante in einer 5 cm dicken Abschältschicht mit den Abfallängen 1.5 cm bzw. 2.5 cm für Temperatur bzw. Dichte ab. Dem schließt sich ein plasmafreies Gebiet an. Die Neutralteilchen werden am "Gefäß" bei $r=55$ cm reflektiert. Der Abstand der Quelle vom Gefäß hat Einfluß auf toroidale Abfallängen der Neutralgasdichte auf Grund einer effektiven Verbreiterung der Quelle.

Wir haben hier ebenfalls (wie in Kap. 4.2) zweidimensional gerechnet, die Profile nun aber nach einer radialen und toroidalen Koordinate aufgelöst.

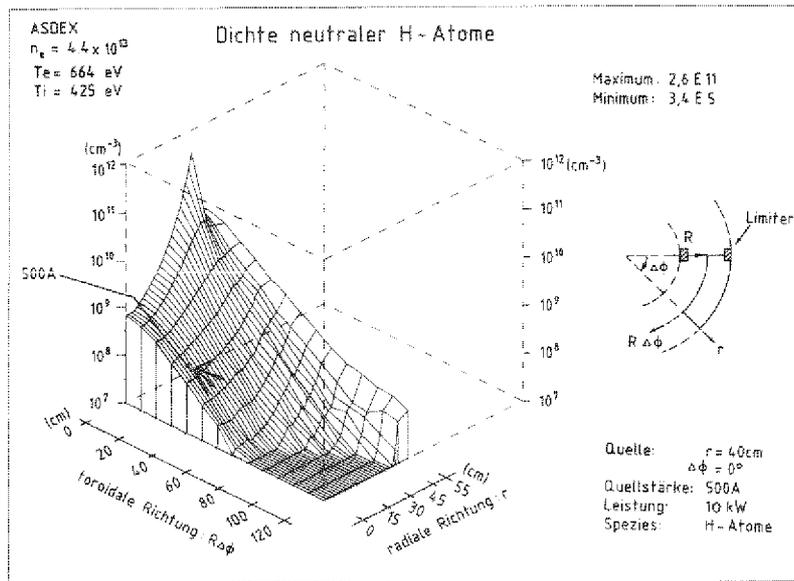


Abbildung 24. Dichte neutraler H-Atome: Radiale und toroidale Verteilung unter Annahme einer poloidal umlaufenden gleichmäßigen Linienquelle bei $r=40 \text{ cm}$

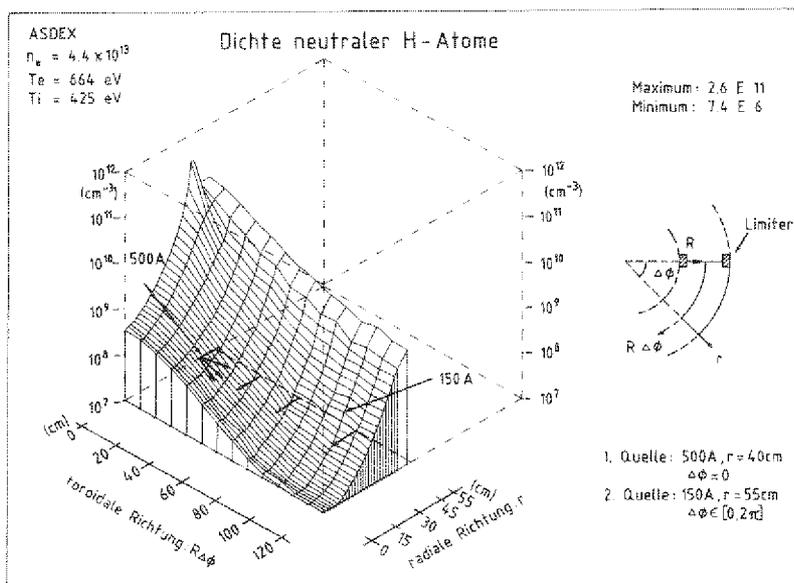


Abbildung 25. Dichte neutraler H-Atome: Radiale und toroidale Verteilung (vergl. Abbildung 24, hier zusätzliche Neutralgaseinströmung von der Torusoberfläche: $r=55 \text{ cm}$).

Abbildung 24 zeigt die Neutralgasdichte, resultierend aus einer poloidal umlaufenden gleichverteilten (Zylinderapproximation) Linienquelle bei $r=40 \text{ cm}$, $z=0$. In Abbildung 25 ist zusätzlich eine gleichverteilte Neu-

tralgas einströmung vom Gefäß ($r=55$ cm, 150 A, 1-dimensional berechnet, dann dem 2-D-Profil überlagert) berücksichtigt.

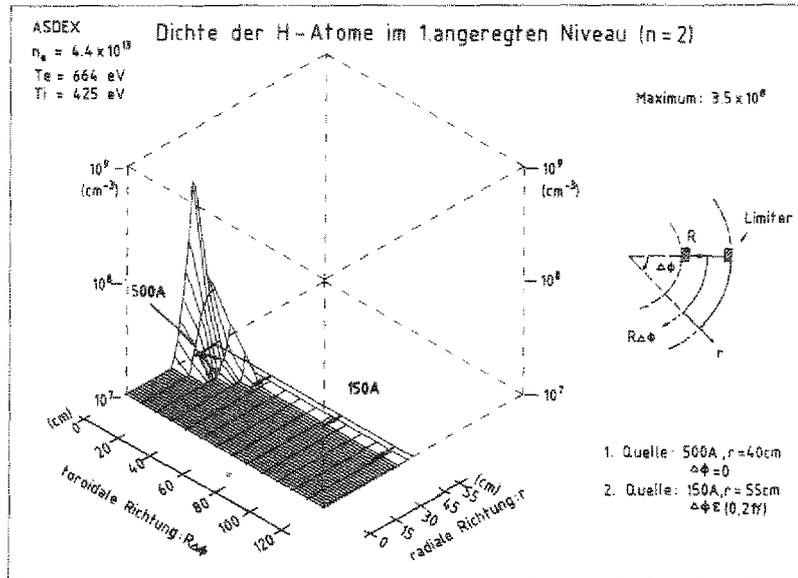


Abbildung 26. Dichte der H-Atome im 1. angeregten Niveau ($n=2$): Radiale und toroidale Verteilung, gem. Stoß-Strahlungsmodell /4.20/ (vergl. Abbildung 25 auf Seite 127).

Die Dichte neutraler H-Atome im 1. angeregten Niveau ($n=2$) (Abbildung 26) spiegelt deutlicher die räumlich begrenzte Neutralgaswechselwirkung mit dem Plasma wieder.

Abbildung 27 auf Seite 129 zeigt den zu Abbildung 24 auf Seite 127 gehörenden Variabilitätskoeffizienten.

Trotz radialen Dichteabfalls um 2-3 Größenordnungen ist die Rechengenauigkeit praktisch unabhängig vom Radius, sie fällt von ca. 4% Fehler nahe bei der Quelle ($z=0$) auf ca. 10% statistische Schwankungen bei $z=50$ cm, hängt im wesentlichen also nur vom toroidalen Abstand ab. Dies wurde durch einen nichtanalogen, das Plasmazentrum bevorzugenden Transportkern erreicht, der ähnlich wie in /0.6/ durch Splitting und Russisch Roulette re-

alisiert wird. Unser Verfahren ist im Unterschied zu jenem aber erwartungstreu, hat also keinen Einfluß auf die Resultate, sondern nur auf die Effektivität des Codes.

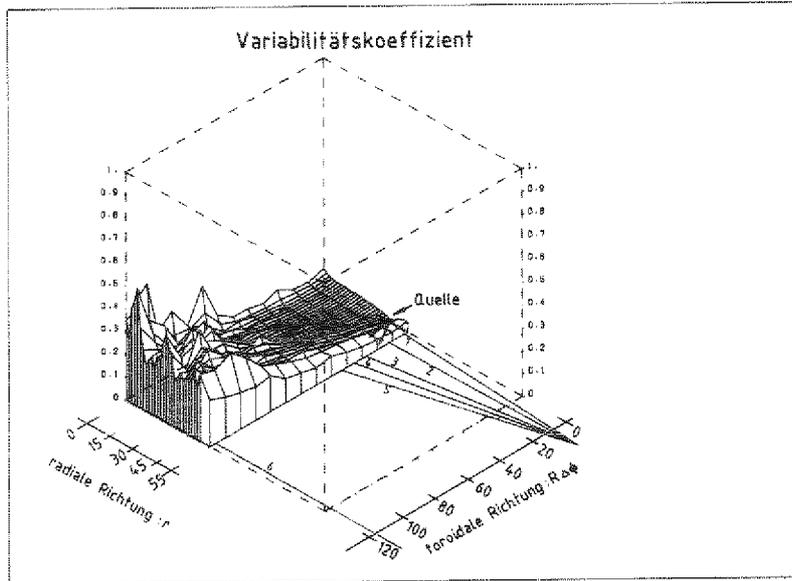


Abbildung 27. Variabilitätskoeffizient: berechnet gem. (3.1.21) für das in Abbildung 24 auf Seite 127 gezeigte Profil. Ferner: Sehstrahlen für Berechnung der Umladungsspektren.

Um die mit einem in der Äquatorialebene seitlich vom Limiter weg schwenkbaren Ladungsaustausch-Analysator, dessen Sehstrahlen in Abbildung 27 angedeutet sind, gemessenen Umladungsflüsse direkt aus der Monte-Carlo-Rechnung ablesbar zu machen, können mit dem Rechencode im Anschluß an die eigentliche Monte-Carlo-Rechnung unter Benutzung der 1-D, 2-D oder 3-D Neutralgasdichten die Flüsse umgeladener Neutralteilchen längs beliebiger Linien aufintegriert werden. Explizit wird berechnet (/0.6/):

$$S(E) = \int_0^1 n_i \cdot \exp(-E/kT_i) / kT_i^{3/2} \cdot E^{1/2} \cdot n_0 \cdot s_{cx}(x,E) \times \exp(-\int_0^x E_{tot}(s,E) ds) dx \quad (4.3.1)$$

(n_i : Ionendichte, n_0 : Neutralgasdichte, s_{cx} : Umladungsrate)

Entsprechend dem experimentellen Aufbau (siehe Abbildung 28 auf Seite 130) haben wir die Flüsse (in: Teilchen/sec/cm²/sterad/eV) längs fünf

Sehstrahlen berechnet, die alle den gleichen (Dreh-) Punkt $x=213.5$, $y=0.0$, $z=-11.5$ cm haben, und deren Abstand von der Limiterposition, gemessen auf der magnetischen Achse, $z=0.0$, $z=15.0$, $z=26.0$, $z=37.0$ und $z=48.0$ cm beträgt.

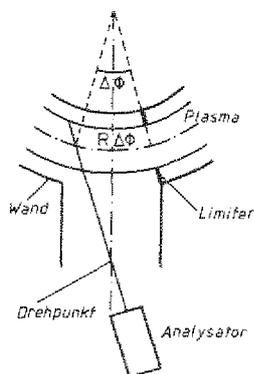


Abbildung 28. Experimenteller Aufbau, schematisch /4.5/

Die Werte $S(E)$ hängen von der radial und toroidal ortsabhängigen Verteilung der Umladungsstoßdichte $n_i \cdot n_0 \cdot s_{cx}$ ab, ferner noch von der Transparenz des Plasmas für Umladungsneutrale (letzter Faktor in (4.3.1)). Beides kann sich unterschiedlich auf den hoch- und niederenergetischen Teil des Spektrums auswirken, wenn man die Position des Sehstrahls relativ zur Quelle für Neutralteilchen und den Plasmamparametern (z.B. senkrecht oder schräg aufs Plasmazentrum gerichtete Sehstrahlen) ändert.

Aus der Steigung des hochenergetischen Teils des Spektrums kann die maximale Ionentemperatur längs des Sehstrahls geschätzt werden. Für die im folgenden angegebenen Werte haben wir die Steigung von

$$-\ln(S(E)/E^{1/2})^{-1} \quad \text{für } 3kT_{i,\max} < E < 8kT_{i,\max}$$

verwendet. ($kT_{i,\max}$ = maximale eingegebene Ionentemperatur längs der Integrationslinie, hier also $kT_{i,\max} = 425$ eV).

Wir finden für die auf diese Weise rückgerechnete Ionentemperatur:

Sehstrahl 1 ($z = 0$) $kT_i = 396$ (eV)

Sehstrahl 2 ($z = 15$) $kT_i = 411$ (eV)

Sehstrahl 3 ($z = 26$) $kT_i = 415$ (eV)

Sehstrahl 4 ($z = 37$) $kT_i = 424$ (eV)

Sehstrahl 5 ($z = 48$) $kT_i = 418$ (eV)

Die größere Genauigkeit mit zunehmendem toroidalen Abstand von der Limiterposition ist eine Folge abnehmender Beiträge zur Umladungsstoßdichte im äußeren, kälteren Teil des Plasmas längs des Sehstrahls.

Vergleiche experimentell gewonnener (/4.5/, /4.6/) und theoretischer Spektren ergaben zunächst eine zu kleine toroidale Abfallänge letzterer und damit auch der zu Grunde liegenden Neutralgasprofile. Allerdings stimmten berechnete Spektren in größerem Abstand von der Quelle sehr gut mit den Experimenten überein. Abbildung 29 zeigt einen solchen Vergleich für Spektren zum Sehstrahl 5 und einem weiteren Sehstrahl 6 ($z=114$ cm, senkrecht auf die magnetische Achse gerichtet).

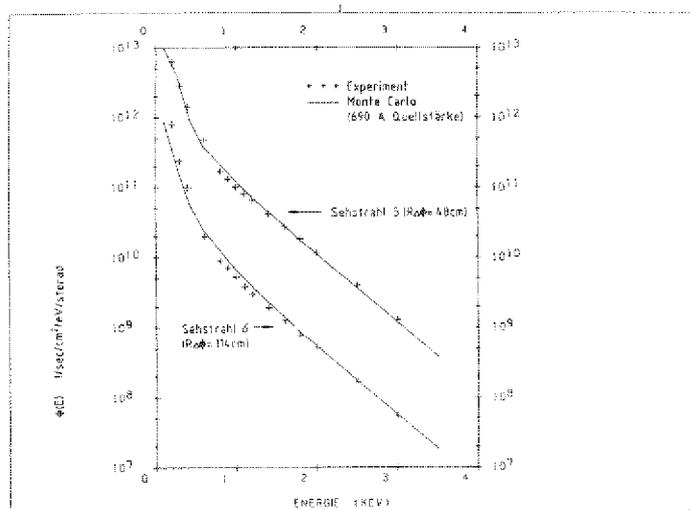


Abbildung 29. Vergleich experimentell und numerisch gewonnener Spektren: hier längs zweier Sehstrahlen in großem Abstand vom poloidalen Limiter

Diese gute Übereinstimmung ist relativ unempfindlich (mit Schwankungen $\leq 30\%$ in den Energiespektren) gegen Modifikationen des verwendeten Reflexionsmodells, hier lag zu Grunde: Modifikation 4, d.h. 100% Recycling und 5 mit $e_1=1$, $e_2=0.5$, $e_3=0.$, d.h. diffuse Reflexion, aber Reflexionswahrscheinlichkeit und Energiereflexionskoeffizient abhängig vom Einfallswinkel. Die H-Atome (reflektierte Ionen mit maxwellverteilter Geschwindigkeit bei einer Temperatur von 60 eV) starteten cosinusverteilt um eine Parallele zur z-Achse in der radialen Position $r=40$ cm. Die Quellstärke mußte mit 690 A angesetzt werden ($=4.3 \cdot 10^{21}$ Teilchen/sec).

Die Hinzunahme der zweiten Neutralgasquelle zur Simulation des Recyclings am Gefäß konnte zwar die Übereinstimmung mit den längs der Sehstrahlen 1 bis 4 gemessenen Spektren verbessern, gleichzeitig ging dann aber die Übereinstimmung beim Sehstrahl 6 verloren. Die gleichförmige Neutralgas-einströmung vom Gefäß gewinnt ja mit wachsendem Abstand vom Limiter an Einfluß auf das Gesamtverhalten. Wir glauben deshalb, die beobachteten Abweichungen in unmittelbarer Limiternähe auf Nebeneffekte, z.B. verursacht durch den Duct für den Ladungsaustauschanalysator direkt neben dem Limiter oder eine poloidal nicht gleichförmige Limiterwirkung, zurückführen zu können, während abgesehen davon das Neutralgasverhalten vom Code korrekt wiedergegeben werden kann.

Übereinstimmend mit den experimentellen Befunden (loc.cit.) muß dann geschlossen werden, daß bei Entladungen mit materiellem Limiter (anders als bei Divertorentladungen) Recycling am Gefäß als primäre Quelle für neutralen Wasserstoff nur eine untergeordnete Rolle spielt. Unter dieser Annahme (auch die Neutralgasquelle durch Volumenrekombination wurde hier nicht berücksichtigt, dazu siehe Kap. 4.4 und 4.5) und mit der aus dem Vergleich mit dem Experiment gewonnenen Quellstärke von 690 A am Limiter liefern die Monte-Carlo-Rechnungen unter anderem die in der Tabelle 4.3.1 auf Seite 133 aufgelisteten Schätzwerte.

Tabelle 4.3.1

 A_{\parallel}^1 A_{\perp}^2 A_{\perp}^3 A_{H/H_2}^4

Teilchen- und Energieflüsse (A bzw. kW)				
Flüsse vom Limiter	690 A 13.8 kW	-- --	-- --	-- --
(CX)-Flüsse auf die Wand	388 A	279 A	1546 A	370/14 A
im Energiebereich:				
0 ≤ E ≤ 5 eV	45 A	27 A	1006 A	45/14 A
5 ≤ E ≤ 200 eV	291 A	190 A	482 A	272/0 A
200 ≤ E ≤ 400 eV	37 A	44 A	45 A	42/0 A
Leistungszunahme durch Ladungsaustausch	73.5 kW	83.3 kW	71.1 kW	68.7 kW
Leistungsverlust durch Ionisation	61.1 kW	69.5 kW	60.0 kW	58.6 kW
Neutralgasdichten (1/cm ³)				
Torusmittelwert	2.6E9	2.0E9	1.6E10	1.8E10/5.9E9
in der toroidalen Position des Limiters: Mittel über poloidalen Querschnitt				
bei ρ=0	1.1E11 5.7E8	1.1E11 5.7E8	1.2E11 4.7E8	9.7E10/8.4E10 4.4E8/0.0
bei ρ=40	6.9E11	1.2E12	7.1E11	6.7E11/0.0
Abfalllänge der Dichte in toroidaler Richtung (cm)				
Mittel über poloidalen Querschnitt	18.2	17.8	51.7	16.3/26.2
bei ρ=0	21.0	23.8	20.1	19.8/--
bei ρ=40	11.4	14.1	11.8	10.5/--

¹ im Text beschriebenes Simulationsmodell² wie 1, aber die Teilchen starten am Limiter cosinusverteilt um eine senkrecht auf die magnetische Achse gerichtete Wandnormale³ wie 1, aber e3=1, d.h. mit Anteilen von gerichteter Reflexion, vergl. Seite 107⁴ wie 1, aber Modifikation 3 des Reflexionsmodells, d.h. H₂-Moleküle explizit im Modell berücksichtigt

Bei TEXTOR-Entladungen findet dagegen vermutlich ein wesentlicher Teil des Recyclings am Liner statt. Eine quantitative Aussage sollte möglich sein, wenn man gemessene Umladungsspektren, aufgenommen in unterschiedlichen Positionen relativ zu den Limitern, mit Simulationsergebnissen vergleicht. Die theoretischen Werte sind dabei in unmittelbarer Limiternähe zwar statistisch präziser, die modellbedingten Unsicherheiten werden dort aber größer.

4.4 TEXTOR, DREIDIMENSIONALE RECHNUNGEN

Abbildung 30 zeigt den poloidalen Querschnitt bei Rechnungen mit dem Datensatz T (Tab. 4.1.1), die Plasmaparameter sind Transportcoderechnungen angepaßt und in Abbildung 31 gezeigt.

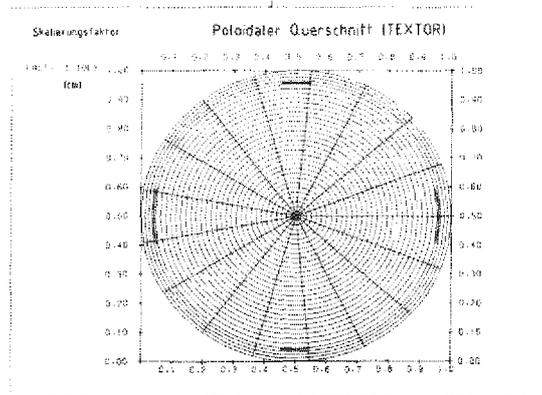


Abbildung 30. Poloidaler Querschnitt: Datensatz T (Tab. 4.1.1), mit Limiterflächen, vergl. Kap. 3.6.5

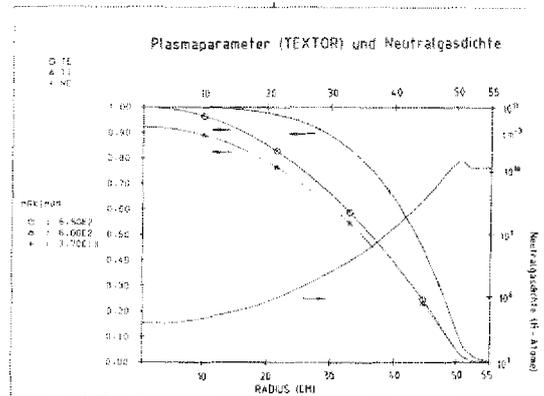


Abbildung 31. Plasmaparameter und Neutralgasdichte (TEXTOR), vergl. Tab.4.1.1

Für die Quellstärke an den Limitern ergab sich bei diesen Rechnungen 1190 Amp, dieser Wert wurde auch zur Skalierung aller hier angegebenen Ergebnisse verwendet.

Es wurden radial, poloidal und toroidal aufgelöste Profile berechnet unter Berücksichtigung der toroidalen Geometrie. Bei einem Teil der Läufe (T1) lag die Quelle auf der Torusinnenseite (der linke in Abbildung 30 auf Seite 134 gezeigte Limiter), sonst (T2) ist der äußere (rechte) Limiter die Quelle der 1190 Amp H-Atome. Die Neutralteilchen starten von dort (kleiner Radius gleich 50 cm, Gleichverteilung in poloidaler Richtung auf dem Limiter und feste toroidale Position $\phi=0$) monoenergetisch (60 eV) und cosinusverteilt nach innen.

In den Abbildungen 32 bis 37 sind einige poloidale Dichteprofile in verschiedenen toroidalen Abständen $n \cdot \Delta\phi$ ($\Delta\phi=12^\circ$, $n=0$, $n=2$ und $n=5$) gezeigt, und zwar für den inneren Limiter (Abb. 32, Abb. 33 und Abb. 34, alle auf Seite 136) sowie für den äußeren (Abb. 35, Abb. 36 und Abb. 37, alle auf Seite 137).

Die Rechnungen zeigen kleinere Abfalllängen λ_{tor} der über einen poloidalen Querschnitt gemittelten Dichte in toroidaler Richtung für den Fall T2 (äußerer Limiter), nämlich $\lambda_{\text{tor}}=18$ cm (gemessen auf der magnetischen Achse), gegenüber $\lambda_{\text{tor}}=25$ cm für den Fall T1 (innerer Limiter). Dies bestätigt die schon in Kapitel 4.2 angeführte geometrische Erklärung toroidaler Effekte auf das Neutralgasverhalten.

Die erwähnten mittleren Dichten betragen (pro 1190 Amp Quellstärke): $1 \cdot 10^{11}$ (T2) bzw. $7.5 \cdot 10^{10}$ (T1) für $\phi=0^\circ$ ($8.1 \cdot 10^{10} + 1.4 \cdot 10^{11}$ (T2M) bzw. $6.2 \cdot 10^{10} + 9.1 \cdot 10^{10}$ (T1M)). T1M bzw. T2M sind die gleichen Modelle wie T1 bzw. T2, mit der einzigen Ausnahme, daß die Modifikation 4 des Reflektionsmodells durch die Modifikation 3 (explizite Berücksichtigung neutraler Moleküle, 100% Recycling bei doppelt gezählten Molekülen) ersetzt wurde. Nach wie vor entstehen an der Quelle (dem Limiter) in diesem Modell nur H-Atome, während des random-walks verwandelt sich das Testteilchen u.U. mehrfach in ein Molekül (bei Wandprozessen) und wieder zurück in ein H-Atom (durch Dissoziation). Folgerichtig wird nach dieser Änderung des Reflexionsmodells vom Code zusätzlich ein dreidimensionales Dichteprofil für H_2 -Moleküle ausgegeben.

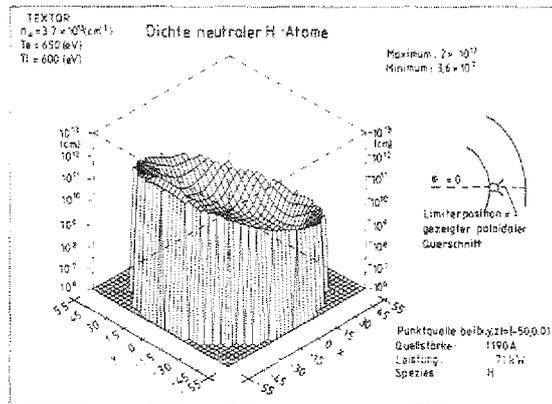


Abbildung 32. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): Radiale und poloidale Verteilung in der toroidalen Position $\phi=0^\circ$ der Limiter, Quelle: innen

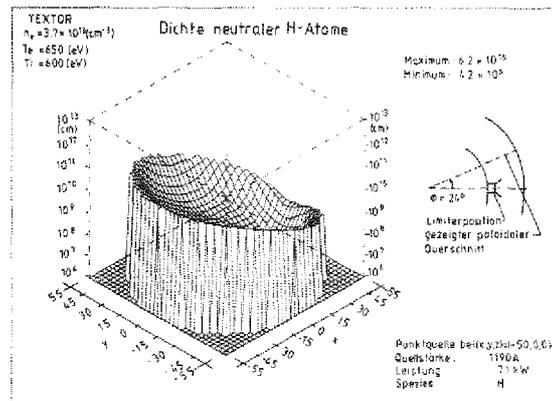


Abbildung 33. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): vergl. Abbildung 32, hier: toroidaler Abstand $\phi=24^\circ$ von den Limitern.

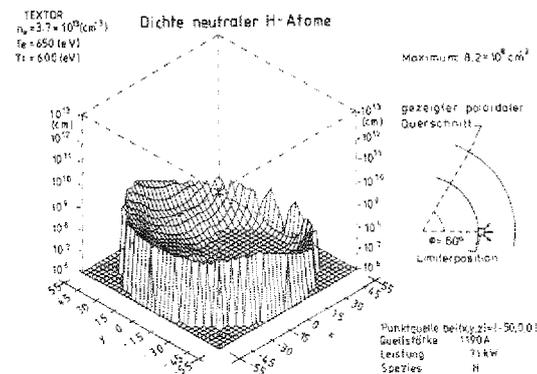


Abbildung 34. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): vergl. Abbildung 32, hier: toroidaler Abstand $\phi=60^\circ$ von den Limitern.

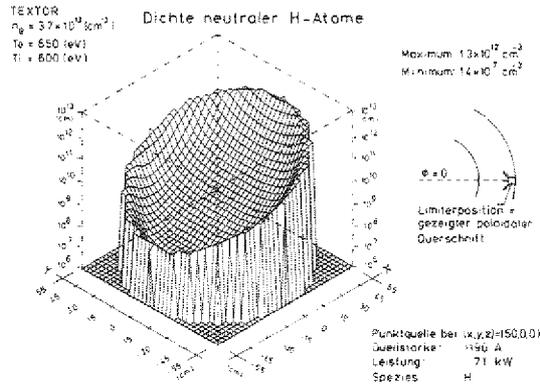


Abbildung 35. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): Radiale und poloidale Verteilung in der toroidalen Position $\phi=0^\circ$ der Limiter, Quelle: außen

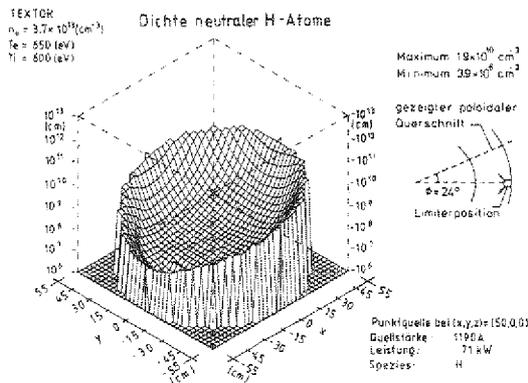


Abbildung 36. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): vergl. Abbildung 35, hier: toroidaler Abstand $\phi=24^\circ$ von den Limitern.

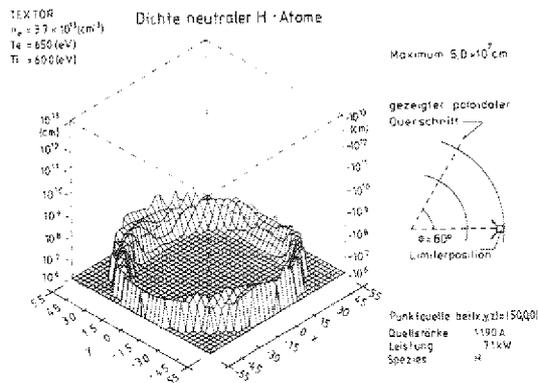


Abbildung 37. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): vergl. Abbildung 35, hier: toroidaler Abstand $\phi=60^\circ$ von den Limitern.

Der zweite Summand der oben für T1M und T2M angegebenen gemittelten Dichte ist aus diesem Profil berechnet, der erste ist die Dichte der H-Atome, die nun wegen der expliziten Berücksichtigung von Molekülen bei gleicher Quellstärke geringer ausfällt.

Im toroidalen Abstand $\phi=24^\circ$ ergibt sich:

$1.8 \cdot 10^9$ (T2) bzw. $4.1 \cdot 10^9$ (T1) und bei expliziter Berücksichtigung von Molekülen:

$1.0 \cdot 10^9 + 3.3 \cdot 10^9$ (T2M) bzw. $3.2 \cdot 10^9 + 6.8 \cdot 10^9$ (T1M), ferner, im toroidalen Abstand $\phi=60^\circ$ von den Limitern: $7.3 \cdot 10^6$ (T2) bzw. $7.8 \cdot 10^7$ (T1) sowie $1.2 \cdot 10^6 + 2.6 \cdot 10^6$ (T2M) bzw. $7.2 \cdot 10^7 + 2 \cdot 10^8$ (T1M).

Die radiale Abhängigkeit der H_2 -Dichte ist ähnlich wie schon am Simulationsbeispiel U (UNITOR) gezeigt. Hier ist die Dichte praktisch konstant im Bereich $50 < r < 55$ cm (ca. $3.5 \cdot 10^{10}$) und fällt dann in dem Streifen $45 < r < 50$ cm vollständig auf Null ab.

Die poloidalen Abhängigkeiten der Neutralgasdichte mit den Maxima bei den Limitern (also bei $\theta=0^\circ$ im Fall T2 oder T2M und bei $\theta=180^\circ$ für T1 und T1M) werden mit zunehmendem toroidalem Abstand geringer, die Maxima sind bei $\phi=48^\circ$ gleichmäßig verschmiert. In noch größerem toroidalem Abstand von der Quelle bildet sich poloidal ein Dichtemaximum auf der Torusinnenseite aus, also selbst dann, wenn das Plasma durch den Limiter außen begrenzt wird.

Allerdings wird hier die Volumenquelle durch Strahlungsrekombination (1.7 Amp bei Verwendung der in Kap. 4.1.3 gezeigten Raten) wichtiger. Sie liefert eine Dichte von $\approx 4.6 \cdot 10^6$ cm⁻³ im Torusmittel, abfallend von $1.3 \cdot 10^7$ am Liner auf $6 \cdot 10^5$ im Plasmazentrum.

Dies ist z.B. für die Wahl des toroidalen Abstandes eines Neutralteilchenanalysators von der Limiterposition von Bedeutung. Ist dieser Abstand bei den hier verwendeten Plasmaparametern kleiner als ca. 40° , dann müssen zur Interpretation der Messungen auch durch Limiterwirkung bedingte poloidale Abhängigkeiten in Betracht gezogen werden. Als Beispiel dazu haben wir die Umladungsflüsse bei $\phi=24^\circ$, Limiter außen, in verschiedenen poloidalen Positionen θ berechnet.

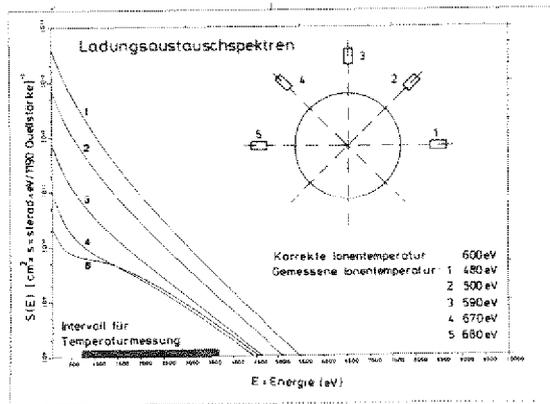


Abbildung 38. Numerische Umladungsspektren: integriert längs verschiedener senkrecht auf die magnetische Achse gerichteter "Sehstrahlen".

In Abbildung 38 sind die Flüsse gezeigt, sowie die daraus berechenbaren Ionentemperaturen. Bemerkenswert ist der Wendepunkt in der zum gegenüber der Quelle liegenden Analysator gehörenden Kurve. Er erklärt sich aus den schon im vorigen Abschnitt erwähnten Effekten durch ortsabhängige Umladungsstoßdichte und Plasmatransparenz.

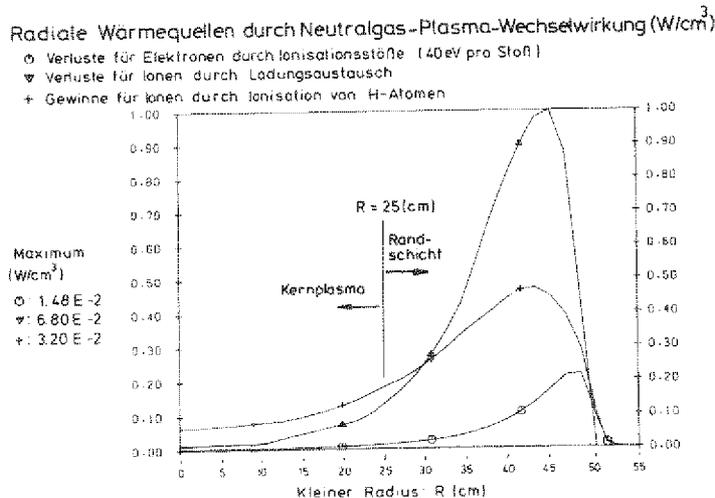


Abbildung 39. Wärmequellen durch Ladungsaustausch und durch Ionisation: Radiale Verteilung, vergl. Abb. 43 auf Seite 141

Die Abbildung 39 auf Seite 139 zeigt die radiale Verteilung der Quellterme durch atomare Prozesse für die Energiebilanzgleichungen. Die Dicke der Randschicht (gem. der Definition in der Einleitung) beträgt im hier beschriebenen Fall 30 cm. 98% der insgesamt ca. 200 kW Energieverluste durch Umladungsstöße stammen aus dieser Schicht, ferner finden hier auch 98% aller Ionisationsereignisse statt.

In den Abb. 41, Abb. 42 und Abb. 43 (alle auf Seite 141) sind die Stoßdichten für Ladungsaustausch, für Ionisation durch Elektronenstoß sowie der Energieverlustterm durch Umladung zusätzlich poloidal aufgelöst. Der Variabilitätskoeffizient (für Abb. 41 auf Seite 141) ist in Abb. 40 gezeigt.

Das Maximum der Ionisationsstoßdichte ($1 \cdot 10^{16}$ Ionisationen pro sec und pro cm^3) liegt ca. 5 cm innerhalb von der Limiterinnenkante (hier bei 50 cm angesetzt) und fällt in poloidaler Richtung nach ca. 90° , in radialer Richtung wieder nach etwa 30 cm, auf 1% ab.

Die Umladungsstoßdichte verhält sich ähnlich, lediglich die Absolutwerte liegen etwas höher ($1.65 \cdot 10^{15}$ im Torusmittel gegenüber $7.2 \cdot 10^{14}$ für Ionisation).

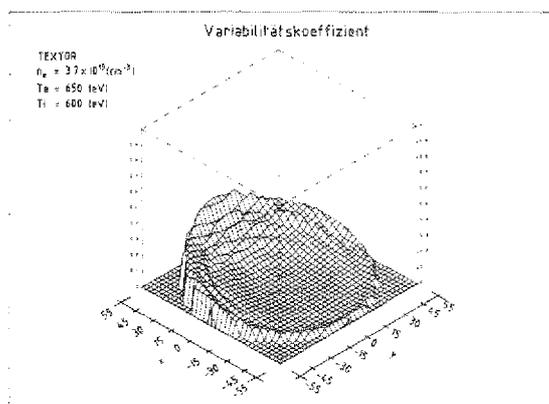


Abbildung 40. Variabilitätskoeffizient für Umladungsstoßdichteprofil: vergl. Abbildung 41 auf Seite 141

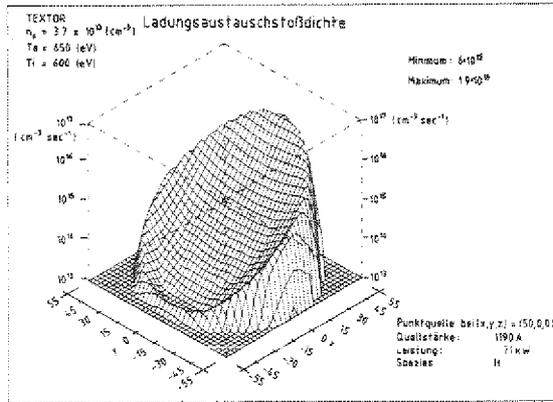


Abbildung 41. Ladungsaustauschstoßdichte: Radiale und poloidale Verteilung, gemittelt über die toroidale Koordinate

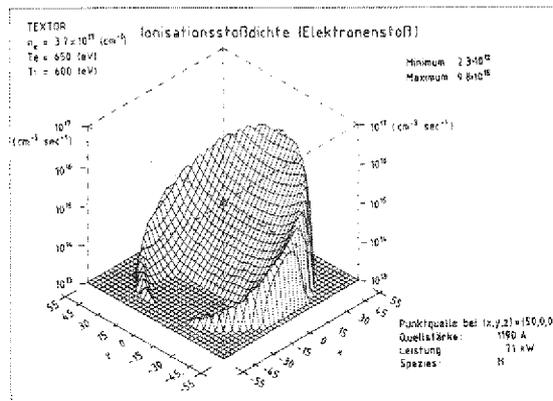


Abbildung 42. Ionisationsstoßdichte (Elektronenstoß): vergl. Abbildung 41

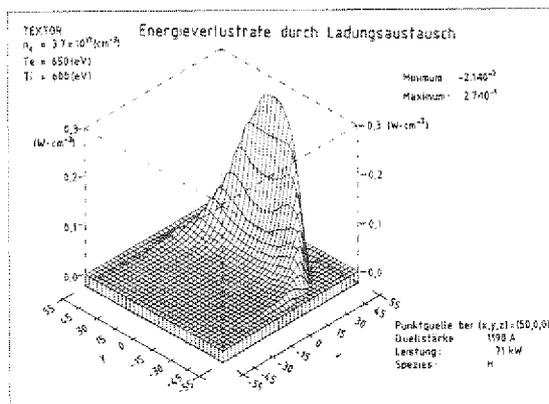


Abbildung 43. Energieverlustrate durch Ladungsaustausch: Radiale und poloidale Verteilung, gemittelt über die toroidale Koordinate

Der Einfluß des Reflexionsmodells (hier: in jedem Fall 100% Recycling bei doppelt gezählten Molekülen) sowie der Plasmabegrenzung durch den Limiter (innen oder außen) ist in einer globalen Bilanz in Tab. 4.4.1 zusammengefaßt (die statistischen Fehler der einzelnen Posten sind kleiner als 5%).

Tabelle 4.4.1

	T1	T2	T1M	T2M	TR
Teilchenflüsse (Amp)					
Quelle (nur H)	1190	1190	1190	1190	1.67
Reflexion H	810	950	380	440	0.95
H ₂	---	---	230	270	---
Quelle für H durch Dissoziation von H ₂	---	---	300	350	---
<hr/>					
Verluste von H ₂ durch Dissoziation	---	---	-220	-260	---
Flüsse auf den Liner H	-810	-950	-820	-950	-0.95
H ₂	---	---	- 10	- 17	---
H-Verluste durch Ionisation	-1190	-1190	-1030	-1010	-1.67
<hr/>					
Energieflüsse (kW) (nur H-Atome)					
Quelle	71.4	71.4	71.4	71.4	0.75
Ladurgsaustausch	213.5	212.6	183.3	185.1	0.10
Reflektierte Neutralteilchen	32.4	36.8	28.1	31.0	0.05
Dissoziation von H ₂	---	---	1.05	1.23	---
<hr/>					
Ionisation	-176.0	-167.8	-162.2	-151.0	-0.61
Flüsse auf den Liner	-138.8	-153.1	-123.8	-134.4	-0.28

(Im Modell TR wurde als einzige Quelle Strahlungsrekombination berücksichtigt, ferner wurde hier in Zylinderapproximation gerechnet und die Modifikation 4 - 100% Recycling, aber Moleküle nicht explizit behandelt - verwendet).

4.5 JET, NICHTKREISFÖRMIGER QUERSCHNITT

Der D-förmige Plasmaquerschnitt bei Simulationen mit dem Datensatz J ist in Abbildung 44 gezeigt. Als Quelle haben wir einen auf der Außenseite umlaufenden "toroidalen Limiter" angesetzt, ohne räumliche Ausdehnungen zu berücksichtigen (Linienquelle).

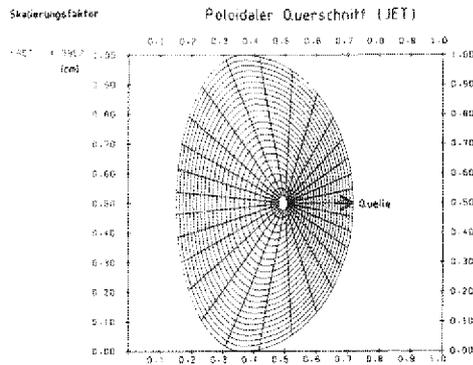


Abbildung 44. Poloidaler Querschnitt (JET): Datensatz J (Tab. 4.1.1), System $\Sigma_{d,p}$ (vergl. (3.6.2))

Die Neutralteilchen starten in diesem Modell dort monoenergetisch mit einer Energie von 10 eV cosinusverteilt nach innen.

Die Absorptionsmechanismen sind bei den hier angenommenen Plasmamparametern so stark, daß die übliche Splitting- und Russisch Roulette Technik, wie sie auch in anderen Monte-Carlo Codes oft eingesetzt wird, nicht mehr ausreicht. Die Abbildung 45 auf Seite 144 und Abbildung 46 auf Seite 144 zeigen bei gleichen Rechenzeiten die Variabilitätskoeffizienten für das Dichteprofil Abbildung 47 auf Seite 145, einmal berechnet mit einem analogen und einmal mit einem nichtanalogen Transportkern (der die Torusinnenseite bevorzugt, siehe Anhang B.1). Zufallzahlen mit der Verteilung des nichtanalogen Transportkerns wurden mittels künstlicher Spaltungs- und Absorptionsmechanismen gezogen. Dies ist bei weitem noch nicht optimal, konnte aber unter Erhaltung der vollen Allgemeinheit des Codes programmiert werden, so daß derzeit durch Setzen von Inputparametern ein stetiger Übergang von analogen zu nicht-

analogen Verfahren möglich ist. In einer ausschließlich für Simulationen von JET-Entladungen ausgelegten Version des Codes sollte stattdessen näher am nichtanalogen Kern gesammelt werden, um Schwankungen in den statistischen Gewichten zu dämpfen.

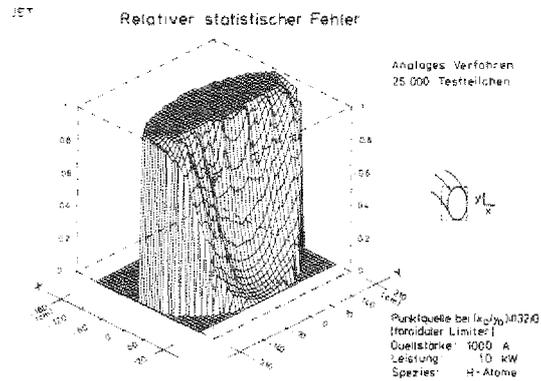


Abbildung 45. Variabilitätskoeffizient (analog): Radiale und poloidale Verteilung des relativen statistischen Fehlers für das Profil in Abbildung 47 auf Seite 145 gem. (3.1.21), hier: analoges Verfahren

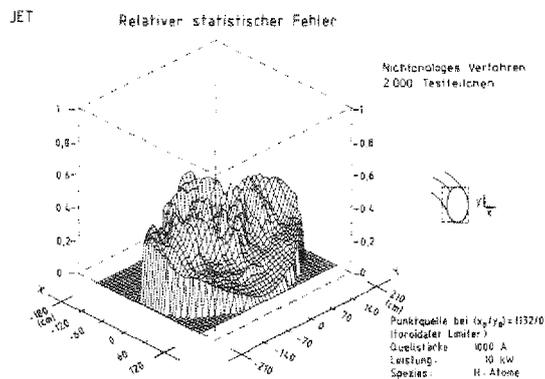


Abbildung 46. Variabilitätskoeffizient (nichtanalog): vergl. Abbildung 45, hier: nichtanaloges Verfahren

Statistische Fehler größer als 100% werden vom Code nicht mehr ausgegeben. Es wurde nicht versucht, über den ganzen poloidalen Querschnitt mit dem analogen Verfahren Fehler kleiner als 100% zu erzielen. Die nötigen Rechenzeiten auf dem Rechner der Kernforschungsanlage Jülich, wo der Code

installiert ist, wäre in Tagen zu messen, zu vergleichen mit einigen Minuten (4 min in Abbildung 46) für den nichtanalogen Algorithmus.

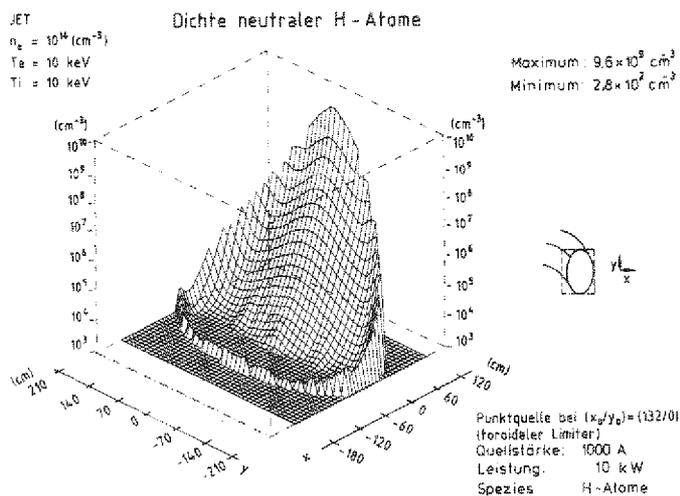


Abbildung 47. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): Radiale und poloidale Verteilung in einem großen dichten Plasma (JET) bei reiner Limitereinströmung von der Torusaußenseite (1000 Amp)

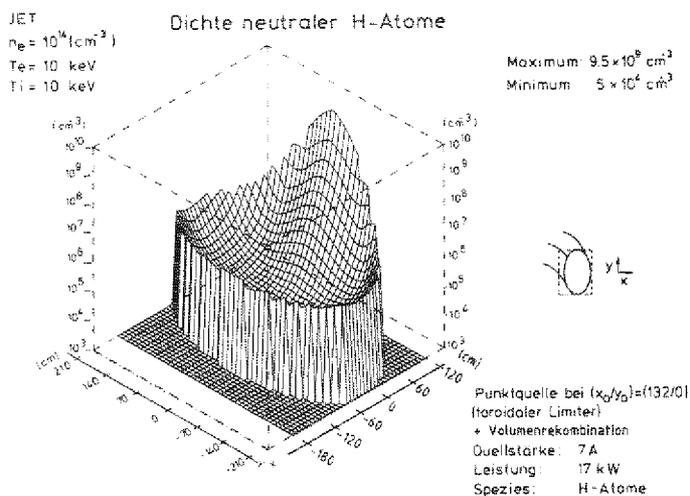


Abbildung 48. Dichte neutraler H-Atome (cm^{-3}): vergl. Abbildung 47, hier zusätzliche Neutralgasquelle durch Strahlungsrekombination (7 Amp)

Die Ergebnisse in diesem Abschnitt sind auf 1000 Amp Quellstärke am Limiter normiert.

Die Neutralgasdichte fällt in radialer Richtung in etwa 30 cm, poloidal nach ca. 30° auf 1% des Wertes direkt an der Quelle ab, insgesamt um 8 Größenordnungen.

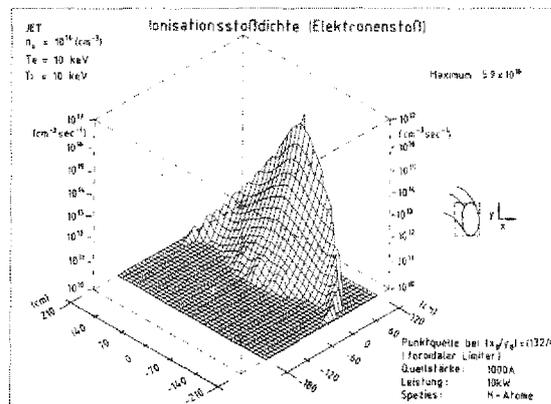


Abbildung 49. Ionisationsstoßdichte (Elektronenstoß): Radiale und poloidale Verteilung bei reiner Limitereinströmung

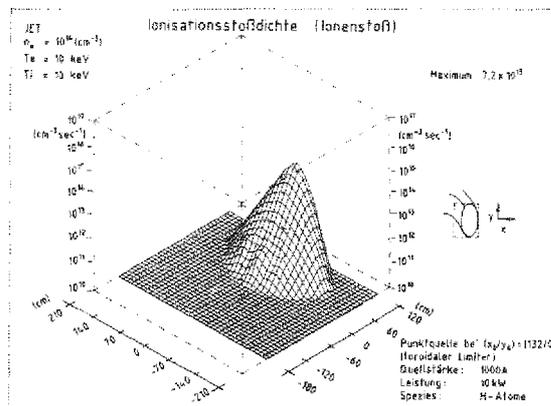


Abbildung 50. Ionisationsstoßdichte (Ionenstoß): vergl. Abbildung 49

Die Abbildung 49 und Abbildung 50 zeigen die radial und poloidal aufgelösten Stoßdichten für Ionisation durch Elektronenstoß bzw. durch Ionenstoß. Letztere Stoßdichte ist im Torusmittel zwar wesentlich kleiner

($6.9 \cdot 10^{11}$ Ionisationen/sec/cm³ und pro 1000 Amp Quellstärke, gegenüber $4 \cdot 10^{13}$ für Elektronenstoß), sie wird aber im Plasmazentrum vergleichbar und ist auf der magnetischen Achse sogar größer ($2 \cdot 10^{10}$ bzw. $8 \cdot 10^9$).

Die Neutralgas"temperatur" (Abbildung 51 auf Seite 148) lag bei allen Rechnungen mit Datensätzen J oder ähnlichen Plasmaparametern im Zentrum höher als die Iontemperatur. Vermutlich können wegen der sehr *starken* Absorptionsmechanismen nur solche Neutralteilchen in diesen Bereich vordringen, deren Energie oberhalb der mittleren (der Iontemperatur entsprechenden) Energie umgeladener Neutralteilchen liegt. Hierdurch bleibt, wie schon bei den Simulationsläufen mit dem Datensatz U (UNITOR), dort allerdings wegen zu *schwacher* Kopplung an das Plasma, die Geschwindigkeitsverteilung der H-Atome bis ins Plasmazentrum stark anisotrop. Das Maximum für die mittlere Neutralteilchenenergie liegt bei unseren Simulationen mit dem Datensatz J bei ca. 22 keV, in der Äquatorialebene und 20 cm jenseits der magnetischen Achse, von der Quelle aus gesehen (für Ionen liegt dieses Maximum genau auf der magnetischen Achse und beträgt in unserem Modell 15 keV). Durch Berücksichtigung von Volumenrekombination, die unter Verwendung der in Kap. 4.1.3 gezeigte Raten bei den Parametern des Datensatzes J eine Quellstärke von 7 Amp liefert, entstehen im Plasmazentrum mehr thermische H-Atome, das Maximum beträgt dann nur noch 18 keV, und eine statistisch signifikante Abweichung von der magnetischen Achse ist nicht mehr erkennbar.

Dies wirkt sich auch auf die Iontemperaturbestimmung mittels Ladungsaustauschanalysatoren (siehe Kap. 4.3) aus. Die stärkeren Gradienten in der Umladungsstoßdichte und die kleinere Transparenz des Plasmas für im Zentrum durch Umladung entstandene Neutralteilchen macht das Meßergebnis stärker von der Position des Sehstrahles abhängig. Es führt insbesondere je nach Limiterposition auch zu überschätzten Iontemperaturen, während wir bei Simulationen der Verhältnisse von Tokamaks der derzeitigen Größenklasse (ASDEX, TEXTOR, etc.) auf Grund der Beiträge von weiter außen umgeladenen H-Atomen zumeist eine Unterschätzung der Iontemperatur durch dieses Messverfahren vorfanden. Letzteres ist auch der Fall, wenn bei Simulationen mit dem Datensatz J die Sehstrahlen in der Nähe der Äquatorialebene liegen (wegen der hier lokalisierten Umladungsstoßdichte).

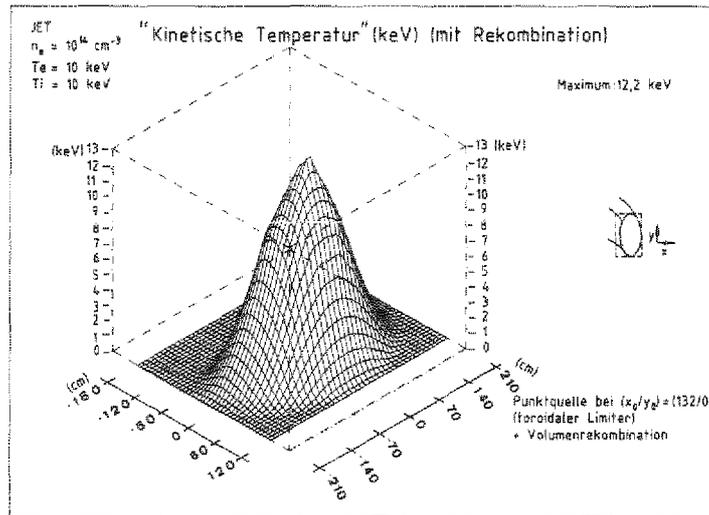


Abbildung 51. "Kinetische Temperatur (keV)" neutraler H-Atome: Radiale und poloidale Verteilung (maximale Ionentemperatur: 10 keV)

θ sei der poloidale Winkel, gemessen von der Torusaußenseite und der Äquatorialebene aus (also von der Limiterposition aus), dann finden wir bei einer "wirklichen" (im Code angesetzten) Ionentemperatur von 10 keV im Plasmakern über das Umladungsspektrum für Sehstrahlen (immer senkrecht auf die magnetische Achse gerichtet) in den durch θ definierten poloidalen Positionen die in Tab. 4.5.1 angegebenen "gemessenen" Ionentemperaturen (in keV).

Tab. 4.5.1

	J	J1	J2	J3	JR	R	C
$\theta = 0^\circ$	5.7	5.8	6.1	6.4	6.8	11.1	6.0
$\theta = 30^\circ$	6.3	6.3	6.4	6.5	8.4	11.3	7.0
$\theta = 60^\circ$	8.3	7.2	7.1	6.6	11.3	12.1	11.1
$\theta = 90^\circ$	17.4	8.9	8.0	6.7	13.1	12.8	20.4

J steht für den oben beschriebenen Datensatz, also reine Limitereinströmung, 1000 Amp. Bei J1, J2 und J3 wurde als einzige Änderung

die Plasmadichte verringert, und zwar von $1 \cdot 10^{14}$ (J) auf $7 \cdot 10^{13}$ (J1), $5 \cdot 10^{13}$ (J2) und $1 \cdot 10^{13}$ (J3) im Zentrum. Deutlich ablesbar aus den ersten 4 Spalten ist die abnehmende Abhängigkeit der gemessenen Ionentemperatur von der poloidalen Position des Sehstrahles mit zunehmender freier Weglänge der Umladungsneutralen (die umgekehrt proportional zur Plasmadichte ist).

Im Datensatz JR ist zusätzlich die Volumenquelle durch Strahlungsrekombination berücksichtigt. Wie stark hierdurch im realen System die Meßgenauigkeit vergrößert wird, hängt von der tatsächlichen Quellstärke am Limiter ab. Mißt man in einer toroidalen Position, in der Einflüsse der Randschicht keine Rolle spielen, dann ergibt sich das mit dem Datensatz R (vorletzte Spalte von Tab. 4.5.1, Strahlungsrekombination als einzige Quelle für Neutralteilchen) simulierte Verhalten. Die (schwache) Abhängigkeit von θ ist bei der hier verwendeten Zylinderapproximation ausschließlich auf den vertikal elongierten Plasmaquerschnitt zurückzuführen.

Ersetzt man die D-förmigen Flußflächen durch volumengleiche konzentrische Kreistori (dann bleibt das Torusvolumen und auch die Anzahl der Ionen und Elektronen global und lokal zwischen zwei Flußflächen erhalten), dann ergibt sich (zum Vergleich mit der ersten Spalte) das in der letzten Spalte unter 'C' angegebene Bild. Da nun Effekte durch die "Shafranov-Shift" nicht mehr im Modell berücksichtigt sind, durch die das Plasmazentrum näher beim äußeren Limiter lag, liegt die "gemessene" Ionentemperatur schon bei kleineren poloidalen Winkeln θ oberhalb der tatsächlichen Ionentemperatur.

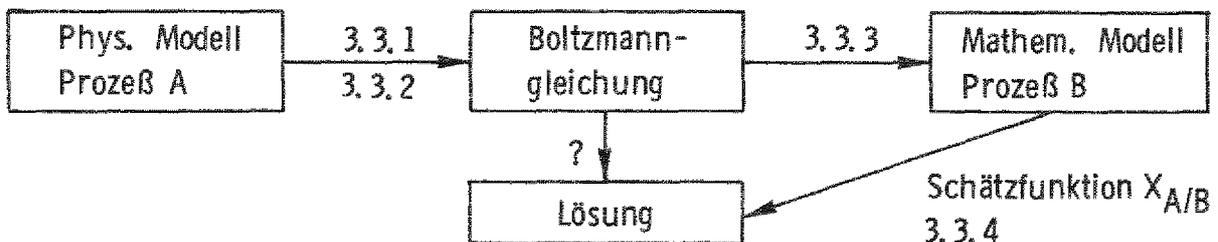
5.0 ZUSAMMENFASSUNG, DISKUSSION DER ERGEBNISSE

Eine theoretische Beschreibung des Neutralgasverhaltens in der Randschicht einer Tokamakentladung erfordert eine genaue Behandlung atomarer und molekularer Prozesse wie Dissoziation, Ionisation, (diagonale und nichtdiagonale) Umladung sowie der Wandprozesse Reflexion, Absorption und Reemission. Das Transportverhalten wird analytisch durch ein System von Integralgleichungen oder Integrodifferentialgleichungen beschrieben, in dem die Gleichungen über die Terme für nichtdiagonale Prozesse gekoppelt sind. Dies kann sowohl den Integralkern als auch die Randbedingungen betreffen.

Zu einer möglichst vollständigen modellmäßigen Erfassung der Wirkungsweise verschiedener Konzepte zur Beeinflussung der Randschicht ist eine flexible, im Einzelfall aber detaillierte Behandlung der Quellen für Neutralgas (durch Plasma-Wand-Kontakt) nötig.

Numerische oder gar analytische Lösungen der Transportgleichungen lassen sich nur unter stark vereinfachenden Annahmen gewinnen. Statistische ("Monte-Carlo"-) Lösungsverfahren sind bei solchen komplexen Modellen das geeignete Mittel, zumal im hier vorliegenden Fall eine Wahrscheinlichkeitstheoretische Formulierung der Aufgabe besonders natürlich ist.

In der vorliegenden Arbeit wurde in Anlehnung an Methoden aus der Neutronentransporttheorie gezeigt, daß dies nicht einen Verzicht auf exakte theoretische Begründung des Verfahrens bedeuten muß. Insbesondere wurde die Beziehung zwischen dem stochastischen Prozeß B, der im Rechner als mathematisches Modell des physikalischen Modellprozesses A nachgebildet wird, und der gesuchten Lösung der Boltzmann-Gleichung hergestellt. Im Monte-Carlo-Algorithmus ist diese Beziehung in Form einer erwartungstreuen Schätzfunktion $X_{A/B}$ enthalten.



Die Freiheiten in der Wahl des Prozesses B mit entsprechend angepaßter Schätzfunktion $X_{A/B}$ können zur Steigerung der Effektivität (statistische Varianz pro Rechenzeit) des Algorithmus benutzt werden (Kap. 3.4), davon wurde in gewissem Umfang beim hier beschriebenen Monte-Carlo-Code Gebrauch gemacht (Kap. 3.5 und Anhang B.1).

Es zeigt sich, daß solche nichtanalogen Verfahren mit zunehmender Größe der Tokamakexperimente an Bedeutung gewinnen, wegen der relativ zu den Gefäßabmessungen kleiner werdenden freien Weglängen für Neutralteilchen, wodurch im Falle einer analogen Simulation große statistische Schwankungen in den Ergebnissen hervorgerufen werden.

Zahlreiche Verfahren, die ursprünglich für Neutronentransportcodes entwickelt und erprobt worden sind, können nach Anpassung auch für die Tokamaksimulation eingesetzt werden. Das Konzept der "bedingten Erwartungswerte" sowie die "exponentielle Transformation des Transportkernes" (als Verallgemeinerung der auch schon in anderen Neutralgascodes eingesetzten "Splitting- und Russisch-Roulette" Technik) gewährleisteten die angestrebte Flexibilität im hier entwickelten Monte-Carlo-Code.

Mit den Simulationsbeispielen in Kap. 4.2 - 4.5 wurde die allgemeine Einsetzbarkeit des Verfahrens bei unterschiedlichen Symmetrieverhältnissen und über große Bereiche von Plasmaparametern demonstriert, insbesondere wurden für Teilchendichte, Stoßdichten und mittlere Teilchenenergie radial, poloidal und/oder toroidal aufgelöste Profile berechnet.

Der Rechencode ist derzeit noch nicht an die Bedingungen eines speziellen Tokamakexperimentes angepaßt und demnach auch nicht für konkrete Fragestellung optimiert. Trotzdem lassen sich einige Schlußfolgerungen aus den Ergebnissen der notwendigerweise nur exemplarisch ausgewählten Simulationsbeispiele ziehen:

Die für einen Reaktorbetrieb notwendige Trennung des Plasmakerns von der Randschicht erfordert eine Mindestgröße des Tokamaks. Sie wird bei den Experimenten der derzeitigen Größenklasse (TEXTOR, ASDEX, etc.) bereits erreicht, wenn auch die Randschicht (hier ca. 30 cm dick) den größeren Teil der Entladung ausmacht. Die Dicke dieser Schicht hängt aber auch vom poloidalen und toroidalen Abstand von der Neutralgasquelle (Limiter, Divertorschlitze oder Gaseinlaß) ab. Dem muß bei der Interpretation von Meßergebnissen (H_{α} -Spektroskopie, Ladungsaustausch-Spektroskopie etc.)

Rechnung getragen werden; nicht nur die Absolutwerte der gemessenen Flüsse, sondern auch die daraus errechneten Ionentemperaturen hängen von der Position der Analysatoren relativ zu den Quellen für Neutralgas ab. Durch Vergleich von Ladungsaustauschflüssen, gemessen mit unterschiedlich positionierten Detektoren, mit berechneten, zwei- oder dreidimensional aufgelösten Neutralgasprofilen lassen sich Aussagen über die Stärke der beteiligten Neutralgasquellen (z.B. Recycling am Gefäß, Recycling am Limiter, Gaseinlaß und Strahlungsrekombination) gewinnen. Für TEXTOR ist z.B. die Neutralgasdichte durch eine lokale ca. 1000 Amp starke Limiterreinströmung in ungefähr 60° toroidalem Abstand vergleichbar mit derjenigen durch Strahlungsrekombination. Dagegen zeigten die Simulationen mit JET-Parametern (toroidaler Limiter) ein über den ganzen poloidalen Querschnitt mit Ausnahme eines kleinen Bereichs nahe dem Limiter von der Volumenquelle dominiertes Neutralgasprofil.

Mit einigen ersten Testläufen wurde der Code auch zur Simulation des Neutralgasverhaltens in dem für TEXTOR vorgesehenen Pumplimiter eingesetzt. Analytisch berechnete Durchlaufwahrscheinlichkeiten von Molekülen hochverdünnter Gase (im "Knudsen-Bereich") durch schmale Spalte und durch zylindrische Röhren konnten mit dem Monte-Carlo-Algorithmus exakt reproduziert werden. Der Vorteil des hier beschriebenen Codes gegenüber anderen bereits für Druckanstiegmessungen in Pumplimitern entwickelten Interpretationscodes (/0.8/) ist einerseits die volle Berücksichtigung der dreidimensionalen Geometrie, andererseits die Tatsache, daß die eingesetzten Schätzverfahren in diesem "stoßfreien" Parameterbereich besonders effektiv werden, während wegen der andernorts verwendeten "Stoßschätzfunktion" erst ein "Pseudoplasma" im Pumplimiter eingeführt werden mußte (loc.cit.), damit die statistische Varianz nicht unendlich wurde.

A.0 DIE TOPOLOGIE DES ZUSTANDSRAUMES

Die Monte-Carlo Verfahren konnten unter Benutzung des Wahrscheinlichkeitsmaßes p auf der Menge aller Trajektorien Ω als korrekt nachgerechnet werden. p ist festgelegt durch die Familie von Übergangsdichten (3.1.16).

Eine Lücke in der Argumentation im Kapitel 3 war die abseits der hier untersuchten Probleme liegende Frage, ob man auf diese Weise wirklich ein Wahrscheinlichkeitsmaß p auf $\Omega = E^{\infty}$, dem unendlichen Produkt des Zustandsraumes E , erhält. In der uns bekannten Literatur wird dies immer mit einem von C. T. I. Tulcea stammenden Resultat aus der Theorie iterierter Integrale (/a.1/, /3.8/) begründet. Dazu sind maßtheoretische Voraussetzungen nötig, in die auch die σ -Algebra \mathcal{B} auf E eingeht.

Der in der vorliegenden Arbeit zu Grunde liegende Zustandsraum E_m war lt. (3.1.13) ein Produkt $M \times R^6$, M eine endliche Menge $\{1, 2, \dots, m, m+1\}$ von Speziesindices und einem Index $m+1$ für den Zustand "absorbiertes Teilchen".

Für den Zustandsraum E_1 (nur eine Spezies von Teilchen) ist in /3.7/ die σ -Algebra explizit konstruiert. Die Voraussetzungen für die Anwendbarkeit des Satzes von Tulcea werden allerdings auch dort nicht nachgerechnet, unter Hinweis auf die Weitschweifigkeit der dann nötigen Ausführungen. Hier sei nur darauf hingewiesen, daß dies auch nicht nötig ist, wenn man an Stelle des Satzes von Tulcea den weniger tiefliegenden Satz von Kolmogoroff (siehe 3.1.3) anwendet, der genauso die Existenz von p sichert, falls zusätzlich E ein metrisierbarer, vollständiger topologischer Raum ist, mit abzählbarer Basis (Bez.: "Polnischer Raum") /3.1/, Paragraph 41. R und M (mit der diskreten Topologie) sind polnische Räume (loc. cit. und /a.2/, Counterexample 1), und mit zwei polnischen Räumen ist auch deren Produkt polnisch (/3.1/, Beispiel 41.2).

Deshalb war im Kapitel 3 der vorliegenden Arbeit der Satz von Kolmogoroff für den hier vorliegenden Zustandsraum E_m anwendbar, wodurch die oben erwähnte Lücke geschlossen ist.

B.0 PRAKTISCHE REALISIERUNG DES TRANSPORTKERNS

Der Transportkern T (3.3.7) stellt die Verteilungsdichte für die Zufallszahl l dar, welche die Weglänge (in cm) eines Testteilchens zwischen zwei Stößen angibt. Im ersten Teil dieses Anhangs wird ein einfach zu programmierender Algorithmus zur Behandlung nichtanaloger Kerne T beschrieben, im zweiten Teil geben wir ein Verfahren an, mit dessen Hilfe die Diskretisierung der Plasmaparameter zwecks Berechnung von Zufallszahlen mit der Dichte T umgangen werden kann.

B.1 NICHTANALOGER TRANSPORTKERN

Wir lassen zur Vereinfachung nicht benötigte Argumente in den Funktionen weg. Laut (3.3.7) ist:

$$T(r_1 \rightarrow r_2) = \Sigma_{\text{tot}}(r_2) \cdot \exp\left(-\int_S ds \Sigma_{\text{tot}}(s)\right) \quad (\text{b.1})$$

Integriert wird längs der geraden Linie S von r_1 nach r_2 . r_m sei der Mittelpunkt desjenigen Teilgebietes, für welches maximale Rechengenauigkeit gewünscht wird (soll der Code überall möglichst gleichmäßig gute Resultate liefern, so ist z.B. r_m der Punkt mit maximalem statistischen Fehler bei Verwendung des analogen Transportkerns T).

$I(\beta(r))$ sei eine monoton fallende Funktion von β , $\beta(r)$ sei der Abstand des Punktes r von r_m , und es sei $\beta_1 = \beta(r_1)$, $\beta_2 = \beta(r_2)$.

Für den nichtanalogeren Transportkern T setzen wir:

$$\begin{aligned} T^*(r_1 \rightarrow r_2) &= I(\beta_2)/I(\beta_1) \cdot T(r_1 \rightarrow r_2) \\ &= \Sigma_{\text{tot}}(r_2) \cdot \exp\left[-\int_S ds \Sigma_{\text{tot}}(s) + \ln(I(\beta_2)) - \ln(I(\beta_1))\right] \end{aligned} \quad (\text{b.2})$$

(Im Rechencode verwenden wir immer eine Exponentialfunktion für I , so daß der Exponent in (b.2) sich vereinfacht.)

Realisiert man diesen Kern anstatt T , so erhält man im Mittel längere Flugstrecken für Teilchen, die sich auf r_m zubewegen. Entfernen sich die Teilchen von r_m , werden die Flugbahnen im Durchschnitt kürzer als es dem physikalischen Modell entsprechen würde. Zudem ist T^* nicht normiert. Wollte man dies anschaulich interpretieren, müßte man sagen, daß während eines Fluges von r_1 nach r_2 auf r_m zu zusätzliche Teilchen entstehen, andernfalls (beim Entfernen von r_m) verschwinden welche.

Bei jeder Realisierung von T^* ist gem. Kap. 3.4 ein Faktor $I(\beta_1)/I(\beta_2)$ in der Funktion W (definiert in 3.4.3) anzubringen. Bei den Simulationsbeispielen in Kapitel 4 sind nur von dem einen Parameter β abhängende Funktionen I verwendet worden. Diese Funktion wird aber vor Beginn der Simulation explizit gesetzt und kann deshalb, ohne Änderung des eigentlichen Simulationscodes, auch allgemeiner gewählt werden, also:

$$I = I(i, r, v).$$

B.2 STETIG VARIIERENDE PLASMAPARAMETER

Ein ähnlicher Übergang zu einem nichtanalogen Kern T^* ermöglicht es, mit Plasmametern zu arbeiten, die nicht stückweise konstant sind. Insbesondere für die Ankopplung des Neutralgasmodells an die neueren 2-dimensionalen Codes zur Simulation des Randschichtplasmas (/2.19/, /2.20/), die die Abhängigkeit der Plasmametern auch von einer Koordinate parallel zum Magnetfeld berücksichtigen, erscheint uns ein solcher Algorithmus geeignet.

Das Netz, mit dem das betrachtete Volumen diskretisiert wird, ist dann nur noch durch die gewünschte Güte der Ortsauflösung der Neutralgasprofile bestimmt, nicht mehr durch die Gradienten der Plasmametern. Es kann deshalb u. U. grobmaschiger gewählt werden, wodurch Rechenzeit eingespart werden kann. Spezielle Formen des im folgenden beschriebenen Verfahrens werden in Neutronentransportcodes auch eingesetzt (/3.4/, Paragraph 2.6 und /3.48/).

Jeder Raumzelle j des Netzes wird ein in dieser Zelle ortunabhängiger nichtanaloger Querschnitt $\Sigma_{\text{tot}}^*(i, j, \mathbf{v})$ zugeordnet, der analoge Wert sei wieder durch $\Sigma_{\text{tot}}(i, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ gegeben. Anstatt T aus (b.1) wird nun der nichtanaloge Kern T^* :

$$T^*(\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2) = \Sigma_{\text{tot}}^*(j_2) \cdot \exp(-\sum_j l_j \Sigma_{\text{tot}}^*(j)) \quad (\text{b.3})$$

verwendet. Summiert wird im Exponenten über den Index j der Raumzellen, beginnend bei $j=j_1$, dem Index der Zelle, die den Startpunkt \mathbf{r}_1 enthält, endend bei $j=j_2$, wenn der Flug in der Zelle mit dem Index j_2 durch ein Stoßereignis unterbrochen wird. l_j ist die Länge der in Zelle j zurückgelegten Wegstrecke. Aus der Dichte T^* kann mit einem Inversionsverfahren (siehe Kap. 3.2.1) gesammelt werden, wie dies auch in /0.6/ und /0.7/ für die dort beschriebenen Codes mit diskretisierten Plasmaparametern erläutert ist.

Die aufwendige Berechnung der Gewichtskorrektur T/T^* läßt sich durch einen Trick vermeiden. Dazu ist es nützlich, die Transportgleichung für den Fluß ϕ (3.3.63), (3.3.64) in integrodifferentieller Form zu Grunde zu legen. Sie lautet dann:

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{v} / |\mathbf{v}| \phi(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) + \Sigma_{\text{tot}}(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) \cdot \phi(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) \\ = Q(i, \mathbf{r}, \mathbf{v}) + \int d\mathbf{u}' \Sigma_{\text{tot}}(\mathbf{r}, \mathbf{u}') C(\mathbf{r}, \mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{u}) \cdot \phi(\mathbf{r}, \mathbf{u}') \end{aligned} \quad (\text{b.4})$$

C und \mathbf{u} sind dabei wie in 3.3.33 und 3.3.34 definiert. (Die Funktion F , die im Anschluß an Gleichung (3.3.64) auftritt, ist die Greensche Funktion des linken Teiles von (b.4). Transformiert man (b.4) mit dem zugehörigen Greenschen Operator, so erhält man wieder (3.3.63), die Gleichung in integraler Form.)

Der Differenz Σ_{δ} zwischen nichtanalogem und analogem Querschnitt

$$\Sigma_{\delta} = \Sigma_{\text{tot}}^* - \Sigma_{\text{tot}} \quad (\text{b.5})$$

ordnen wir einen "künstlichen" auch als δ -Stoß bezeichneten Prozeß zu, in-

dem wir auf beiden Seiten von b.4 eine "δ-Stoßdichte" $\zeta_\delta = \Sigma_\delta * \phi$ addieren. Dazu wird auf der rechten Seite der Summand $\Sigma_\delta(r, u') \delta(u' - u) \phi(r, u')$ ins Integral aufgenommen. Die δ-Distribution in diesem Summand ist der diesem Prozeß zugeordnete Stoßkern C_δ ; findet ein solcher Stoß statt, ändert sich also weder Spezies noch Geschwindigkeit des Testteilchens. Beide Kerne C und C_δ fassen wir zu C^* zusammen, so daß nun

$$\Sigma_{\text{tot}}^* * C^* \quad \text{mit} \quad C^* = \Sigma_{\text{tot}} / \Sigma_{\text{tot}}^* * C + \Sigma_\delta / \Sigma_{\text{tot}}^* C_\delta \quad (\text{b.6})$$

im Integral auf der rechten Seite von (b.4) steht. Neben einem nichtanalogen Transportkern wird demnach auch ein nichtanaloger Stoßkern C^* verwendet.

Das analoge Monte-Carlo-Verfahren konvergiere gegen

$$I = E(X) = \int dp X = \int dx g(x) \phi(x).$$

Das gleiche Verfahren, aber bei Verwendung der nichtanalogen Kerne T^* und C^* und ohne Gewichtskorrektur konvergiert dann gegen

$$I^* = E(X) = \int dp^* X = \int dx g(x) \phi^*(x)$$

wobei $\phi^*(x)$ die Lösung der Transportgleichung ist, die anstatt der analogen die Kerne T^* und C^* enthält. Nun ist aber $\phi = \phi^*$, weil die Gleichung (b.4) für ϕ nur identisch umgeformt wurde, also ist auch $I = I^*$, weshalb in der Tat nirgends Gewichtskorrekturen bei diesem speziellen nichtanalogen Prozeß berechnet werden müssen.

Das Realisieren des Stoßkernes C^* bereitet keine praktischen Schwierigkeiten. Man hat nur zu setzen:

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{tot}} / \Sigma_{\text{tot}}^* &= p_{\text{echt}} * c_{\text{echt}} & 0 \leq p_{\text{echt}} \leq 1 \\ \Sigma_\delta / \Sigma_{\text{tot}}^* &= (1 - p_{\text{echt}}) * c_\delta \end{aligned} \quad (\text{b.7})$$

Die durch p_{echt} definierte binomische Verteilung legt fest, ob der analoge

Kern C zu realisieren ist, oder ob ein δ -Stoß stattfindet. Die Faktoren c_{echt} und c_{δ} treten in der Schätzfunktion X zusammen mit den Normierungsfaktoren c auf (siehe z.B. Glg. (3.3.68)), sind sie von Eins verschieden, dann enthält der nichtanaloge Prozeß (ähnlich wie in Anhang B.1) künstliche Spaltungs- und Absorptionsprozesse. Ist jedoch $\Sigma_{\text{tot}} \leq \Sigma_{\text{tot}}^*$, dann kann man $c_{\text{echt}} = c_{\delta} = 1$ setzen.

Die in /0.8/ beschriebene "Pseudostoßtechnik" kann als Spezialfall hiervon angesehen werden.

Setzt man im Falle $\Sigma_{\text{tot}} \geq \Sigma_{\text{tot}}^*$ jedoch

$$p_{\text{echt}} = \Sigma_{\text{tot}} / (2 \cdot \Sigma_{\text{tot}} - \Sigma_{\text{tot}}^*),$$

dann ergibt sich (hier jedoch mit wesentlich einfacherem Beweis) die in /3.48/ beschriebene Methode.

LITERATURVERZEICHNIS

- /0.1/ J. Raeder et al.
Kontrollierte Kernfusion
Teubner Studienbücher, 1981
- /0.2/ L. Spitzer Jr.
Rept. No. NYO-993, USAEC, Washington DC, 1951
- /0.3/ IAEA
Technical committee meeting on divertors and impurity control,
proceedings
Garching, Juli 1981
- /0.4/ M.F.A. Harrison et al.
Tokamak fusion reactor exhaust
CLM-R211, Culham Laboratory, 1981
- /0.5/ J. T. Hogan
Calculation of hydrogen density in toroidal plasma
J. Nucl. Mat. Vol. 111/112, p 413, 1982
- /0.6/ M. H. Hughes, D. E. Post
A Monte-Carlo algorithm for calculating neutral gas transport
in cylindrical plasmas
J. comp. phys. 28, 1978, p 43-55
- /0.7/ G. Ritter
Untersuchungen zum Neutralteilchenverhalten in einem Tokamak
Plasma
Dissertation, Universität Düsseldorf, 1982
- /0.8/ D. Heifetz et al.
A Monte-Carlo model of neutral particle transport in diverted
plasmas
PPPL-1843-Report, 1981
- /0.9/ M. T. Robinson, I. M. Torrens
Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids
in the binary-collision approximation
Phys. Rev. B 9, 1974, p 5008

- /0.10/ G. Bateman
Distribution of neutrals scattered off a wall
PPPL Applied Physics Report No. 1
- /0.11/ W. Feneberg, G. H. Wolf
A helical magnetic limiter for boundary layer control in large Tokamaks
Nucl. Fusion 21, 1981, p 669
- /0.12/ W. Feneberg, G. Fuchs, G. H. Wolf
Energy and particle unloading from INTOR using an ergodized magnetic boundary
Proc. 11 Soft, Oxford, 1980, p 1079
- /0.13/ A. B. Rechester, M. N. Rosenbluth
Electron heat transport in a Tokamak with destroyed magnetic surfaces
Phys. Rev. Lett. 40, 1978, p 1
- /0.14/ A. Samain
Decontamination in ergodic divertors
/0.3/, paper IV.C2
- /0.15/ W. Bieger et al.
On mechanical divertors (scrape-off-limiters)
Int. Symp. Plasma-Wall-Interaction, Jülich
Proc. p 609, 1976
- /0.16/ J. Schmidt
Mechanical divertor design considerations
/0.3/, paper IV.R5
- /1.1/ M. Keilhacker et al.
Divertor experiments in ASDEX
/0.3/, paper I.R3
- /1.2/ M. Keilhacker
Physics of divertors and the scrape-off-layer
IPP III/42 Report, 1978
- /1.3/ G. Fuchs, A. Nicolai
Computer modelling of the Tokamak scrape-off-layer including secondary-electron emission and sheath potential at the limiter
Nucl. Fusion, Vol. 20, No. 10, 1980

- /1.4/ A. Nicolai
 Numerical simulation of the transport processes in the
 scrape-off region and the burial chamber of a bundle divertor
 Jour. of Nuc. Mat. 93 & 94, 1980, p 231-237
- /1.5/ Projekt ASDEX
 Statusbericht 1981
 IPP Garching
- /1.6/ F. Engelmann
 Requirements for impurity control, exhaust and plasma-wall
 interaction in the next generation of Tokamaks (JET, JT-60,
 T-15, TFTR) and in reactors (INTOR, etc.)
 /0.3/, summary of the working session III
- /1.7/ E. Hintz
 Plasma boundary diagnostics by laser induced fluorescence
 Physica Scripta Vol. T2/2, 1982, p 454-458
- /1.8/ J. A. Schmidt
 Tokamak impurity-control techniques
 Comments Plasma Phys. Cont. Fusion, Vol. 5, No. 6, 1980
- /1.9/ Y. Shimomura, H. Maeda
 Divertor experiments for controlling plasma-wall interactions
 3rd Int. Conf. on plasma surface interactions in contr. fusion
 defices, Culham, 1978, paper r5
- /1.10/ F. Engelmann, W. J. Goedheer
 Atomic and molecular physics problems in plasma blankets
 IAEA 2nd Technical Committee Meeting on A+M Data for Fusion, Pa-
 ris, 1980
- /1.11/ P. E. Stott, C. M. Wilson, A. Gibson
 The bundle divertor, part I & II
 Reports CLM-P 474 & CLM-P 478
- /1.12/ J. B. Taylor
 Bundle divertors and topology
 CLM-R 132 Report, 1974
- /1.13/ A. J. Wootton et al.
 Review of the results from the DITE bundle divertor
 /0.3/, paper I.R5

- /1.14/ S. J. Fielding, A. J. Wootton
Shielding and exhaust measurements on the DITE bundle divertor
Jour. of Nuc. Mat. 93 & 94, 1980, p 226-230
- /1.15/ G. Fuchs, H. G. Goetze, D. Reiter
Particle and energy unloading from a Tokamak using scrape-off
limiters
- /1.16/ K. Ikuta, M. Okamoto
Superbanana limiter as a possible cooling scheme
Nucl. Fus., Vol. 20, No. 7, 1980
- /1.17/ R. Chodura
Numerical analysis of plasma-wall interaction for an oblique
magnetic field
Jour. Nuc. Mat. 111 & 112, 1982, p 420-423
- /2.1/ D. F. Duchs et al.
A computer model of radial transport in Tokamaks
Nucl. fus. Vol. 17, No. 3, 1977
- /2.2/ J. T. Hogan et al.
A users manual for the Oak Ridge Tokamak transport code
ORNL/TM 5262 Report
- /2.3/ D. E. Post et al.
Working draft of the BALDUR-Documentation
Report 33, Princeton Plasma Physics Laboratory, 1981
- /2.4/ JET workshop on 1-D transport codes and scrape-off layers
compiled and edited by W. G. F. Core and T. E. Stringer, 1981
- /2.5/ R. H. Fowler et al.
FIFPC- a fast ion Fokker-Planck code
Comp. Phys. Comm. 1978, 13, p 323-340
- /2.6/ F. L. Hinton, R. D. Hazeltine
Theory of plasma transport in toroidal confinement systems
Review of modern physics, 48, 2, 1976
- /2.7/ J. T. Hogan
Multi-fluid Tokamak transport models
Methods of comp. phys. Vol. 16, 1976
- /2.8/ R. Lüst, A. Schlüter
Axialsymmetrische magnetohydrodynamische Gleichgewichtskonfi-
gurationen
Z. Naturforschung 12a, 1957

- /2.9/ B. Coppi, R. Dagazian
Magnetic confinement configuration for plasmas carrying high currents
Phys. of fluids Vol. 15, No. 12, 1972
- /2.10/ V. D. Shafranov
Reviews of plasma physics, Vol. 2, 1966, p 103
- /2.11/ K. Lackner
Computation of ideal MHD-equilibria
Comp. Physics Communications, 12, 1976
- /2.12/ A. Nicolai
Time evolution of coil currents shaping and centering a D-shaped reactor plasma
12th SOFT, 1982, Jülich
- /2.13/ J.T. Hogan
The accessibility of high-Beta Tokamak states
Nucl. Fus. Vol. 19, 1979, p 753
- /2.14/ A. Nicolai, D. Reiter
Transportcode calculations on the particle and energy unloading through overlapping magnetic islands
Jour. Nuc. Mat. 111 & 112, 1982, p 428-433
- /2.15/ K. Lackner et al.
One-dimensional code for impurity transport and (non-coronal) impurity radiation
NET Report Nr. 5
- /2.16/ A. Nicolai, D. Reiter
Two-dimensional computer modelling of JET as a specific example of D-shaped Tokamak plasmas
11th Europ. Conf. on contr. fusion and plasma physics, Aachen 1983, paper 128
- /2.17/ A. Nicolai, D. Reiter
Versuch einer integralen Beschreibung axialsymmetrischer Tokamakplasmen
DPG-Frühjahrstagung Würzburg, 1982
- /2.18/ A. Nicolai
Simulation of the Tokamak boundary layer governed by limiters and divertors
/2.4/, p 103-105

- /2.19/ M. Petravic et al.
Cool, high-density regime for poloidal divertors
Phys. Rev. Letters Vol. 48, No. 5, 1982, p 326-329
- /2.20/ D. E. Post et al.
Performance of the INTOR poloidal divertor
J. Vac. Sci. Technol., 20(4), 1982
- /2.21/ R. Chodura et al.
Self-consistent description of the plasma-wall interaction in Tokamak plasmas
9th Int. Conf. on Plasma Phys. and Contr. Nucl. Fusion Research, Baltimore, 1982, paper IAEA-CN-41/D-3-1
- /2.22/ M. Petravic et al.
A model for the performance of poloidal divertors and pump limiters
9th Int. Conf. on Plasma Phys. and Contr. Nucl. Fusion Research, Baltimore, 1982, paper IAEA-CN-41/D-3-2
- /3.1/ H. Bauer
Wahrscheinlichkeitstheorie und Grundzüge der Maßtheorie
De Gruyter, Berlin, 1968
- /3.2/ A. Renyi
Wahrscheinlichkeitsrechnung
VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1979
- /3.3/ S. M. Ermakow
Die Monte-Carlo-Methode
Oldenbourgverlag, 1975
- /3.4/ J. Spanier, E. M. Gelbard
Monte-Carlo principles and neutron transport problems
Addison Wesley Pub. Comp., 1969
- /3.5/ E. James
Monte-Carlo theory and practice
Rep. Prog. Phys. Vol. 43, 1980
- /3.6/ E. D. Cashwell, C. J. Everett
Monte-Carlo method for random walk problems
Pergamon Press, 1959
- /3.7/ J. Spanier
Monte-Carlo methods and their application to neutron transport problems
WAPD-195, 1959

- /3.8/ M. Loeve
Probability theorie
D. van Nostrand Comp., 1960
- /3.9/ C. J. Everett, E. D. Cashwell
A Monte-Carlo sampler
LA-5061-MS Report, 1972
- /3.10/ J. M. Hammersley, D. C. Handscomb
Monte-Carlo methods
Methuen & Co Ltd., 1976
- /3.11/ G. Marsaglia
Random numbers fall mainly in the planes
Proc. Nat. Acad. Sci. 61, 1968
- /3.12/ B. Jansson
Random number generators
Almquist & Wiksell, Stockholm, 1966
- /3.13/ G. Marsaglia
Applications of number theory to numerical analysis
New York: Academic, 1972
- /3.14/ J. H. Ahrens, U. Dieter
Pseudo random numbers
New York: Wiley, 1979
- /3.15/ W. Feller
Zur Theorie der stochastischen Prozesse
Math. Annalen, Vol. 113, 1936
- /3.16/ W. Feller
On the integro-differential equations of purely discontinuous
Markoff Processes
Trans. Am. Math. Soc. 48, p 488-515, 1940
- /3.17/ J. L. Doob
Stochastic processes
John Wiley & Sons, Inc., 1953
- /3.18/ A. T. Bharucha-Reid
Elements of the theory of Markov Processes and their
applications
McGraw-Hill, 1960
- /3.19/ L. Janossy
Note on the fluctuation problem of cascades
Proc. Phys. Soc. ser. A, Vol. 66, p 117-118, 1953

- /3.20/ L. Pal
On the theory of stochastic processes in nuclear reactors
Nuovo Cimento, ser. 10, Vol. 7, suppl. 1, 1958
- /3.21/ R. Sanchez, N. J. Cormick
A review of neutron transport approximations
Nucl. Sci. and Eng. 80, p 481-535, 1982
- /3.22/ Y. C. Kim
Numerische Untersuchungen des Neutralteilchentransportes in der
Wandzone von Tokamakentladungen
Dissertation, Universität Düsseldorf, 1977
- /3.23/ K. Audenaerde et al.
SPUDNUT: A transport code for neutral atoms in plasmas
J. Comput. Phys. 34, 1980
- /3.24/ L. Arnold
Stochastische Differentialgleichungen
Oldenbourgverlag, 1973
- /3.25/ K. M. Case, P. F. Zweifel
Linear transport theory
Addison-Wesley, 1967
- /3.26/ D. Reiter
Monte-Carlo calculations for neutral gas transport in ASDEX and
JET
2nd Workshop on interpretation codes, 1982
- /3.27/ D. Reiter, A. Nicolai
Ein zweidimensionaler Monte-Carlo Code für die Berechnung der
Neutralgasdichte in der Kammer eines Poloidalfelddivertors
DPG-Frühjahrstagung 1981, Hamburg, p 97
- /3.28/ D. Reiter, A. Nicolai
Monte-Carlo-Rechnungen zum Neutralgasaufbau in der
Divertorkammer des ASDEX-Tokamaks
DPG-Frühjahrstagung 1982, Würzburg, p 148
- /3.29/ S. C. Jardin et al.
Two-dimensional modelling of the ZEPHYR-experiment
Internal ZEPHYR-Report No. 34, IPP-Garching, 1981
- /3.30/ E. Greenspan
Calculation of the transport of neutral atoms in highly ionized
plasmas using neutron transport methods
Nucl. Fus. 14, 1974, p 771-778

- /3.31/ H. Witting
Mathematische Statistik
Teubner, 1978
- /3.32/ E. D. Cashwell, C. J. Everett
Intersection of a ray with a surface of third or fourth degree
LA-4299 Report, 1969
- /3.33/ E. M. Gelbard et al.
A new class of Monte-Carlo estimators
J. SIAM Appl. Math. Vol. 14, No. 4, 1966
- /3.34/ J. Spanier
Two pairs of families of estimators for transport problems
J. SIAM Appl. Math. Vol. 14, No. 4, 1966
- /3.35/ J. Spanier
Some results on transport theory and their application to
Monte-Carlo methods
J. of Math. Analysis and Appl. Vol. 17, 1967
- /3.36/ J. Spanier
The physics and mathematical analysis for the TUF-T5
Monte-Carlo code
WAPD-TM-186 Report
- /3.37/ M. H. Kalos et al.
Monte-Carlo methods in reactor computations
Computing methods in reactor physics, p 359-438, Gordon and
Breach, Science Publishers, Inc., 1968
- /3.38/ D. Heifetz et al.
Pumping and erosion rates for the TFTR and INTOR/FED limiter
designs
J. Nucl. Mat. 111 & 112, 1982, p 298-304
- /3.39/ D. Heifetz et al.
Pumping and Helium enrichment of poloidal divertors
USA-Contr. 3rd Meeting of the INTOR Workshop, June 1980
- /3.40/ Y. Seki et al.
Numerical calculations of the Helium ash enrichment and exhaust
by a simple divertor
Nucl. Fus. Vol. 20, No. 10, 1980
- /3.41/ D. Heifetz
Mündliche Mitteilung

- /3.42/ G. E. Albert
 A general theory of stochastic estimates of the Neumann series
 for the solution of certain Fredholm Integral Equations and
 related series
 ORNL-1508 Report, 1953
- /3.43/ M. Leimdörfer
 On the transformation of the transport equation for solving
 deep penetration problems by the Monte-Carlo method
 Trans. Chalmers Univ. Technol., Gothenberg, p 286, 1964
- /3.44/ R. J. Juzaitis
 Predicting the cost of splitting in Monte-Carlo particle trans-
 port
 Nucl. Sci. a. Eng. 80, 1982
- /3.45/ M. H. Kalos
 A Monte-Carlo calculation of the transport of Gamma rays
 NDA 56-7 Report, 1956
- /3.46/ F. J. Allen
 A new Monte-Carlo method for solving neutron and Gamma ray
 transport problem
 BRL-MR-1135 Report, 1958
- /3.47/ E. Kreyszig
 Statistische Methoden und ihre Anwendungen
 Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen, 1967
- /3.48/ L. L. Carter et al.
 Monte-Carlo sampling with continuously varying cross sections
 along flight paths
 Nucl. Sci. a. Eng. 48, 1972
- /3.49/ G. E. Forsythe et al.
 Computer methods for math. computations
 Prentice-Hall, 1977
- /4.1/ R. Behrisch
 Plasma-wall interactions
 Summer School of Tokamak Reactors for Breakeven
 Erice, 1976
- /4.2/ Ali-Khan et al.
 Interaction of atomic Hydrogen (H^0 and H^+) with metallic and
 oxidized metallic surfaces
 Jül-1597 Report, 1979

- /4.3/ P. Wienhold, E. Rota
Mündliche Mitteilungen
- /4.4/ R. Flohr et al.
The Tokamak experiment "UNITOR"- a device for plasma-wall
interaction research
Physica 104C, p 423-433, 1981
- /4.5/ F. Wagner, K. Ch. Wang et al.
Recycling studies on the ASDEX Tokamak by charge exchange
measurements
APS-Conference San Diego, paper 8P1, 1980
- /4.6/ F. Wagner
Mündliche Mitteilung
- /4.7/ Kernforschungsanlage Jülich GmbH, IPP
Das Forschungsprogramm an TEXTOR von 1983 bis 1993
Februar 1983
- /4.8/ H. Conrads, G. H. Wolf
TEXTOR- Ein Prüfstand für die Fusionsforschung
Jahresbericht 1981/82 der Kernforschungsanlage Jülich
- /4.9/ W. G. Core, M. L. Watkins
Mündliche Mitteilung
- /4.10/ The JET project
EUR-JET-R5, 41, 1975
- /4.11/ A. Nicolai, D. Reiter
A multicode describing the time evolution of the atomic
Protium, Deuterium and Tritium densities in the first wall of a
Tokamak reactor
Eingereicht bei: J. Comp. Phys.
- /4.12/ D. Reiter, A. Nicolai
Monte-Carlo simulation of the neutral gas density and tempera-
tur distribution due to the recycling processes at a poloidal,
toroidal or Mushroom limiter and at the divertor plate of a
poloidal divertor
J. Nucl. Mat. 111 & 112, p 434-439, 1982
- /4.13/ R. L. Freeman, E. M. Jones
Atomic collision processes in plasma physics experiments
Part I & II
CLM-R 137 & CLM-R 175 Reports, 1974

- /4.14/ A. C. Riviere
Penetration of fast Hydrogen atoms into a fusion reactor plasma
Nucl. Fus. Vol. 11, 1971
- /4.15/ R. D. Bengston
The study of plasma formation in fusion devices
Diagnostics for fusion experiments, Pergamon Press, 1980
- /4.16/ Yu. N. Dnestrovskij et al.
Recombination-induced neutral particle flux in Tokamaks
Nucl. Fus. Vol. 19, No. 3, 1979
- /4.17/ W. Lotz
Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate
coefficients for atoms and ions from Scandium to Zinc
IPP 1/76 Report, Garching, 1968
- /4.18/ S. Rehker, E. Speth
Rate coefficients for interaction of monoenergetic particle
beams with maxwellian plasmas
IPP 2/217 Report, Garching, 1974
- /4.19/ W. G. F. Core
A 2-D model for the calculation of neutral transport in Tokamaks
with non-circular magnetic surfaces
11th Europ. conf. on contr. fusion an plasma physics, Aachen
1983, paper 128
- /a.1/ C. T. I. Tulcea
Mesures dans les espaces produits
Atti. Accad. Naz. Lincei Rend.,
Cl. Sci. Fis. Mat. Nat. 7, 1949
- /a.2/ L. A. Steen, J. A. Seebach
Counterexamples in topology
Holt, Rinehart and Winston, Inc. 1970

Die vorliegende Arbeit wurde am Institut für Plasmaphysik der Kernforschungsanlage Jülich angefertigt. Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr. G. Wolf, der diese Arbeit angeregt, gefördert und durch wertvolle Hilfestellungen erst ermöglicht hat.

Herrn Prof. Dr. J. Uhlenbusch danke ich für die Übernahme der Koreferenz dieser Arbeit.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. H. Kever, für zahlreiche Hinweise und persönliche Unterstützung, und Herrn Dr. A. Nicolai, der diese Arbeit betreut hat, für hilfreiche Diskussionen.

Frau P. Börner danke ich für geduldige Unterstützung in Programmierfragen.

Allen anderen Mitarbeitern des Instituts, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, möchte ich meinen herzlichen Dank aussprechen.

