

Institut für Energieforschung (Plasmaphysik), FZJ und Institut für Theoretische Physik A Lehr- und Forschungsgebiet Laserphysik, RWTH-Aachen

3D numerische Parameterstudien zum Verunreinigungstransport in TEXTOR-DED

Heinke Gerd Frerichs

# 3D numerische Parameterstudien zum Verunreinigungstransport in TEXTOR-DED

von

Heinke Gerd Frerichs

Diplomarbeit in P H Y S I K

vorgelegt der

# Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften der RWTH Aachen

im Oktober 2006

angefertigt im

Institut für Theoretische Physik A Lehr- und Forschungsgebiet Laserphysik Prof. Dr. Hans-Jörg Kull

Zweitgutachter: Prof. Dr. Detlev Reiter

## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung		1
<b>2</b>	Ato	omare Prozesse	<b>5</b>
	2.1	Grundlagen atomarer Prozesse	5
		2.1.1 Prozessraten	6
	2.2	Modellierung atomarer Prozesse	7
		2.2.1 Korona-Modell	8
		2.2.2 Stoß-Strahlungs-Modell	8
	2.3	Implementierung in den EMC3-Code	8
		2.3.1 Das ADAS-Projekt	9
	2.4	Vergleich der Modelle	11
3	Pla	sma-Modellierung	17
0	3 1	Fluidbeschreibung des Plasmas	17
	0.1	3.1.1 Austauschterme	18
		3.1.2 Bilanzøleichungen	21
	3.2	Das Plasmamodell des EMC3-Codes	23
	0.2	3.2.1 Modellierung des Hauptplasma	$\frac{20}{24}$
		3.2.2 Modellierung von Verunreinigungen	29
		3.2.3 Rückwirkung auf das Hauptplasma	32
4	Pla	smarandschicht-Modellierung mit EMC3-EIBENE	33
-	4.1	Aufbau von TEXTOR-DED	33
	4.2	Das EMC3-EIRENE Codepaket	35
		4.2.1 Quellterme in Bilanzgleichungen	36
		4.2.2 Transport von Verunreinigungen	37
	4.3	Magnetfeldgitter	39
		4.3.1 Magnetfeldmodellierung im GOURDON-Code	41
		4.3.2 Gittergenerierung	43
	4.4	Simulationsablauf	$\overline{45}$
			10
<b>5</b>	Par	ameterstudien zum Verunreinigungstransport	<b>49</b>
	5.1	Verunreinigungen in der Plasmarandschicht	50

### INHALTSVERZEICHNIS

		5.1.1	Verunreinigungsquelle	)
		5.1.2	Verunreinigungsdichten 53	,
		5.1.3	Ionisationsgleichgewicht	j
		5.1.4	Verunreinigungs-Kreislauf	,
		5.1.5	Thermokräfte	)
		5.1.6	Rückwirkung auf das Hauptplasma 63	,
		5.1.7	Modell für atomare Prozesse	,
		5.1.8	Vergleich mit dem Experiment	ļ
	5.2	Variat	ion von Inputparametern	2
		5.2.1	Plasmadichte	2
		5.2.2	Heizleistung	,
		5.2.3	Senkrechter Teilchentransport	j
	5.3	Absch	rmeffekt des DED	)
	5.4	Ladun	gsaustausch 92	
6	Zus	ammei	nfassung 101	
6	Zus	ammei	nfassung 101	
6 A	Zus Syn	ammei nbolvei	nfassung 101 rzeichnis 105	
6 A B	Zus Syn Cou	ammer nbolver 110mb-1	nfassung 101 vzeichnis 105 Stöße 107	
6 A B	Zus Syn Cou B.1	ammer nbolver 110mb-{ Umfor	nfassung 101 zeichnis 105 Stöße 107 mung des Boltzmann Stoßintegrals	
6 A B	Zus Syn Cou B.1 B.2	ammer nbolver ilomb-: Umfor Effekt:	nfassung101vzeichnis105Stöße107mung des Boltzmann Stoßintegrals108ver Wirkungsquerschnitt109	
6 A B	Zus Syn Cou B.1 B.2 B.3	ammer nbolver ilomb- Umfor Effekt Impuls	nfassung101vzeichnis105Stöße107mung des Boltzmann Stoßintegrals108ver Wirkungsquerschnitt109saustausch110	
6 A B	<b>Zus</b> <b>Syn</b> <b>Cou</b> B.1 B.2 B.3 B.4	ammer nbolver ilomb- Umfor Effekt Impuls Energi	Infassung       101         vzeichnis       105         Stöße       107         mung des Boltzmann Stoßintegrals       108         ver Wirkungsquerschnitt       109         saustausch       110         eaustausch       113	
6 A B	Zus Syn Cou B.1 B.2 B.3 B.4 Git	ammer nbolver ilomb-: Umfor Effekt Impul: Energi	nfassung101zzeichnis105Stöße107mung des Boltzmann Stoßintegrals108ver Wirkungsquerschnitt109saustausch110eaustausch110eaustausch113rdinaten115	
6 A B C	<b>Zus</b> <b>Syn</b> <b>Cou</b> B.1 B.2 B.3 B.4 <b>Git</b> <sup>4</sup> C.1	ammer nbolver ilomb- Umfor Effekt Impula Energi terkoor Bilinea	nfassung101vzeichnis105Stöße107mung des Boltzmann Stoßintegrals108ver Wirkungsquerschnitt109saustausch110eaustausch113rdinaten115are Interpolation115	
6 A B	Zus Syn B.1 B.2 B.3 B.4 Gitt C.1 C.2	ammer nbolver ilomb- Umfor Effekt Impuls Energi terkoor Bilines Koord	nfassung101vzeichnis105Stöße107mung des Boltzmann Stoßintegrals108ver Wirkungsquerschnitt109saustausch110eaustausch111edinaten115inatentransformation117	

### Kapitel 1

### Einleitung

In der Fusionsforschung werden magnetisch eingeschlossene heiße Plasmen untersucht, die idealerweise aus reinem Wasserstoff (bzw. den Isotopen Deuterium und Tritium) bestehen. In der Realität sind aber immer auch andere Elemente zu kleinen Anteilen im Plasma enthalten, welche unter dem Begriff *Verunreinigungen* zusammengefasst werden. Es gibt verschiedene Mechanismen, wie diese Verunreinigungen ins Plasma gelangen:

- Helium als Abfallprodukt der Fusionsreaktion
- Wandmaterial, das beim Kontakt mit dem Plasma erodiert wird (Be, C, Fe, T, ...)
- Injektion von Gasen (He, N, Ne, Ar) um die Strahlungseigenschaften des Plasmas zu beeinflussen

Verunreinigungen können den Betrieb eines Fusionsexperiments und auch eines späteren Fusionsreaktors entscheidend beeinflussen. Im heißen Kernplasma führen Verunreinigungen mit niedriger Kernladungszahl Z zu einer Verdünnung der Wasserstoffkomponente des Plasmas und damit zu einer Erhöhung des Plasmadrucks p. Dies ist problematisch, da der maximale Plasmadruck  $p_{\text{max}}$  für ein stabiles Gleichgewicht durch das Magnetfeld <u>B</u> vorgegeben ist. Bei Verunreinigungen mit hoher Kernladungszahl Z sind die Energieverluste durch Strahlung viel problematischer, da diese nicht vollständig ionisiert werden. Dies kann zu einer starken Kühlung des Plasmas und zur Unterschreitung der Brennbedingung führen. Die maximal zulässige Verdünnung ist abhängig von der Kernladungszahl Z der Verunreinigungen und nimmt mit zunehmendem Z stark ab. Für Kohlenstoff liegt der kritische Anteil, bei dem die Hälfte der erzeugten Energie abgestrahlt wird, bei etwa 5 %, für Eisen jedoch schon bei etwa 0.1 % [39]. In der kühleren Plasmarandschicht ( $T \leq 100 \,\mathrm{eV}$ ) haben Verunreinigungen aber durchaus auch positive Effekte. Dort werden die Elemente mit niedrigem Z nicht vollständig ionisiert und strahlen daher besonders stark. Durch eine isotrope Abstrahlung wird die Leistungsabfuhr aus der Randschicht auf einen größeren Wandbereich verteilen, womit die lokale Belastung der Wand reduziert wird.

Die Plasmarandschicht spielt aufgrund der extremen Gegensätze und besonderen Anforderungen eine zentrale Rolle für den erfolgreichen Betrieb eines Fusionsreaktors. Heißes Plasma trifft in dieser Region auf einen kalten Festkörper (Wand), wobei Wandmaterial erodiert wird. Auf der einen Seite sollen durch die Plasmarandschicht möglichst viele Verunreinigungen aus dem Kernplasma abgepumpt werden, und auf den anderen Seite soll der lokale Teilchenfluss auf die Wand minimiert und Kernplasma vor den am Rand entstehenden Verunreinigungen abgeschirmt werden.

Genau zu diesem Zweck wurde im Institut für Plasmaphysik am Forschungszentrum Jülich der Tokamak TEXTOR um einen Dynamisch Ergodischen Divertor (DED) erweitert [15]. Dieser erzeugt eine Störung des Magnetfeldes in der Randschicht, die zu einer Ergodisierung des Magnetfeldes führt, welche (u. a.) eine Abschirmung des Kernplasmas vor Verunreinigungen bewirken soll.

Aufgrund der (durch das Störfeld erzeugten) komplexen dreidimensionalen Struktur des Magnetfeldes ist es sinnvoll, experimentelle Untersuchungen durch Computersimulationen zu ergänzen. In der vorliegenden Arbeit werden numerische Rechnungen zum Transportverhalten von Verunreinigungen in der Plasmarandschicht von TEXTOR-DED durchgeführt. Dies geschieht mit Hilfe der dreidimensionalen Monte-Carlo Codes EMC3 und EIRENE, die miteinander gekoppelt wurden.

Der EMC3-Code [12, 11, 10, 13] wurde im Max-Planck-Institut für Plasmaphysik in Greifswald von Yühe Feng für die Stellaratoren W7-AS und W7-X entwickelt und berechnet lokale Plasmaparameter in einem stationären Zustand. Der EIRENE-Code [35] wurde im Institut für Plasmaphysik am Forschungszentrum Jülich von Detlev Reiter entwickelt und berechnet den Transport von Neutralteilchen. Beide Codes wurden miteinander gekoppelt und für TEXTOR-DED angepasst [28]. Der Vorteil des EMC3-Codes ist die Anwendbarkeit auf eine komplexe 3D-Geometrie, im Gegensatz zum 2D-Code B2 [3], welcher ebenfalls an den EIRENE-Code gekoppelt wurde [38]. In früheren Arbeiten [27, 18] wurden für TEXTOR bislang nur Simulationen eines reinen Wasserstoffplasmas durchgeführt. Mit der vorliegenden Arbeit werden diese Arbeiten um Simulationen eines durch Kohlenstoff verunreinigten Plasmas ergänzt. Bei den in der Plasmarandschicht von Fusionsexperimenten vorkommenden Dichten  $(10^{13} - 10^{15} \text{ cm}^{-3})$  und Temperaturen (1 - 100 eV) ist der klassische Transport von geladenen Teilchen durch Stöße bestimmt, zumindest für die Richtung parallel zu <u>B</u> (für die Richtung  $\perp \underline{B}$  wird ein adhoc Ansatz, ohne Spezifikation der physikalischen Natur, verwendet, durch den der anomale senkrechte Transport berücksichtigt wird). Zur Untersuchung von Transportprozessen in einem stoßdominierten und verunreinigten Plasma ist diese Arbeit in vier Hauptteile aufgeteilt:

- Einzelstöße, welche wesentlich von der atomaren Struktur der beteiligten Teilchen abhängen, werden in Kapitel 2 behandelt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das einfache Korona-Modell für atomare Prozesse im EMC3-Code um ein allgemeineres Stoß-Strahlungs-Modell ergänzt. Beide Modelle werden beschrieben und miteinander verglichen. Dabei wird ausgenutzt, dass Transportprozesse aufgrund der unterschiedlichen Zeitskalen getrennt von atomaren Prozessen behandelt werden können.
- Transportgleichungen für Dichte, Impuls und Energie einer kompletten Teilchenspezies werden in Kapitel 3 für ein Vielkomponenten-System hergeleitet. Aus der zunächst allgemeinen Form werden danach die approximierten Modellgleichungen des EMC3-Codes für ein schwach verunreinigtes Plasma hergeleitet.
- Die Vorbereitungen und der Ablauf einer Simulation der Plasmarandschicht von TEXTOR-DED werden in Kapitel 4 beschrieben. Desweiteren wird dort der Aufbau des EMC3-EIRENE-Codepackets sowie die numerische Behandlung von Verunreinigungen kurz beschrieben. Eine besondere Eigenschaft von EMC3-EIRENE ist die Berücksichtigung der realen DED-Spulenkonfiguration, deren Magnetfeld nach Biot-Savart berechnet wird.
- In Kapitel 5 werden dann die Studien zum Verunreinigungstransport ausführlich diskutiert. Dazu werden zunächst die Verunreinigungsquelle sowie der Transport in einem konsistenten Hintergrund-Plasma mit festen Inputparametern untersucht (Kapitel 5.1). Danach werden verschiedene Inputparameter für das Hauptplasma variiert und deren Auswirkung auf den Transport von Verunreinigungen untersucht (Kapitel 5.2). Dabei wird sich zeigen, dass der Verunreinigungsgrad des Plasmas entscheidend durch das lokale Ionisationsgleichgewicht beeinflusst wird und somit ein nichttrivialer Zusammenhang zur Verunreinigungsquelle besteht. Anschließend wird die Abschirmwirkung des DED (Kapitel 5.3) sowie der Effekt durch Ladungsaustausch zwischen neutralem Wasserstoff und Verunreinigungsionen (Kapitel 5.4) untersucht. Hier werden die Rechnungen eine deutliche Reduktion an Verunreinigungen durch den DED zeigen. Desweiteren wird sich zeigen,

dass die Berücksichtigung von Ladungsaustausch im Wesentlichen zu einer Änderung der Strahlungsverteilung von Verunreinigungen führt.

Zum Schluss werden die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit in Kapitel 6 zusammengefasst und ein Ausblick auf mögliche zukünftige Projekte gegeben.

### Kapitel 2

### Atomare Prozesse

Neben elastischen Stößen zwischen zwei Teilchen A und B, bei denen neben dem Gesamtimpuls die gesamte kinetische Energie  $E_{kin} = E_{kinA} + E_{kinB}$ beider Teilchen zusammen erhalten bleibt, gibt es bei Atomen und deren Ionen auch inelastische Stöße. Bei diesen wird ein Teil der kinetischen Energie in eine Form von innerer Energie umgewandelt (Endotherme Prozesse) oder umgekehrt innere Energie in kinetische Energie (Exotherme Prozesse). Solche inelastischen Prozesse hängen wesentlich von der atomaren Struktur der beteiligten Teilchen ab (deshalb der Begriff *atomare Prozesse*) und können auch zu einer Änderung der Identität der Teilchen führen. Atomare Prozesse sind deshalb grundlegend für den Transport von Verunreinigungen und damit für die lokale Zusammensetzung des Plasmas.

### 2.1 Grundlagen atomarer Prozesse

Die wichtigsten atomaren Prozesse in der Plasmarandschicht sind [22]:

- Elektronische Anregung / Abregung
- Ionisation / Rekombination
- Ladungsaustausch

Die quantitative Beschreibung atomarer Prozesse erfolgt durch die Angabe von Wirkungsquerschnitten  $\sigma$ , wie sie z.B. in [23, 21, 24] für die oben aufgelisteten Prozesse in der Plasmarandschicht angegeben werden. Für den Prozess

$$X: \quad A+B \quad \to \quad A'+B'$$

gibt der Wirkungsquerschnitt  $\sigma_x$  die effektive Querschnittsfläche der Teilchen bei diesem Prozess an. Für die Berechnung von Plasmaparametern (s. Kapitel 3) und bei bekannten Geschwindigkeitsverteilungen  $f_A, f_B$  der Teilchensorten A und B (also z.B. der Maxwellverteilung im Fall von thermalisierten Teilchen, von denen wir im Folgenden ausgehen) ist jedoch die (Prozess)rate  $R^{(X)}$  bzw. der Ratenkoeffizient  $\mathcal{R}^{(X)}$  eine geeignetere Größe.

### 2.1.1 Prozessraten

Die Rate  $R^{(X)}$  eines Prozesses X gibt die Anzahl der Prozesse pro Volumen und Zeit an und ist durch die Dichten der beiden beteiligten Teilchenspezies  $n_A, n_B$  und den Ratenkoeffizienten  $\mathcal{R}^{(X)}$  gegeben:

$$R^{(\mathrm{X})} = n_A n_B \mathcal{R}^{(\mathrm{X})}. \tag{2.1}$$

 $\mathcal{R}^{(X)}$  ist durch den Wirkungsquerschnitt  $\sigma_x$  und die Verteilungsfunktion  $f(v_{rel})$  der Relativgeschwindigkeit  $v_{rel}$  bestimmt:

$$\mathcal{R}^{(\mathrm{X})} \equiv \langle \sigma_{\mathrm{x}} v_{\mathrm{rel}} \rangle = \int d^3 v_{\mathrm{rel}} f(v_{\mathrm{rel}}) \sigma_{\mathrm{x}}(v_{\mathrm{rel}}) v_{\mathrm{rel}}.$$
(2.2)

Bei Stößen zwischen Elektronen und Ionen (bei vergleichbaren Temperaturen  $T_e, T_i$ ) ist die Relativgeschwindigkeit im Wesentlichen durch die der Elektronen gegeben:  $v_{\rm rel} \approx v_e$ . Die Mittelung des Wirkungsquerschnitts erfolgt dann mit der Maxwellverteilung der Elektronen bei der Temperatur  $T_e$ :

$$f_e(T_e, v_e) = \left(\frac{m_e}{2\pi T_e}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m_e v_e^2}{2 T_e}\right].$$
 (2.3)

Der Ratenkoeffizient hängt somit allein von der Elektronentemperatur ab:  $\mathcal{R}^{(X)} = \mathcal{R}^{(X)}(T_e)$ . Bei Stößen zwischen Ionen untereinander (oder zwischen Ionen und Atomen) ist dies nicht mehr gültig. Allerdings kann gezeigt werden, dass sich  $f(v_{\rm rel})$  wieder auf eine Maxwellverteilung für Teilchen der Masse  $m_{ab}$  und Temperatur  $T_{ab}$  mit

$$m_{ab} = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}, \qquad T_{ab} = \frac{T_a m_b + T_b m_a}{m_a m_b}$$
 (2.4)

reduziert:

$$f_{ab}(v_{\rm rel}) = \left(\frac{m_{ab}}{2\pi T_{ab}}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m_{ab} v_{\rm rel}^2}{2 T_{ab}}\right].$$
 (2.5)

Damit ergibt sich für den Ratenkoeffizienten die Abhängigkeit

$$\mathcal{R}^{(\mathrm{X})} = \mathcal{R}^{(\mathrm{X})}(T_{ab}, m_{ab}) = \int d^3 v_{\mathrm{rel}} f_{ab}(v_{\mathrm{rel}}) \,\sigma_X(v_{\mathrm{rel}}) \,v_{\mathrm{rel}}.$$
 (2.6)

### 2.2 Modellierung atomarer Prozesse

Bei der Modellierung von atomaren Prozessen, wie sie für die Berechnung von Transportprozessen in verunreinigten Plasmen Anwendung findet, ist von entscheidendem Vorteil, dass elektronische An- und Abregungsprozesse auf einer Zeitskala

$$\tau_{\rm exc} \sim 10^{-8} / Z^4 \,\mathrm{s}$$
 (2.7)

ablaufen, die sehr viel kleiner ist, als die von diffusiven ( $\tau_{\rm diff}$ ) und konvektiven ( $\tau_{\rm conv}$ ) Transportprozessen [40, 22]. Bei einer Gradientenlänge von  $\Delta L \sim 10 \,\mathrm{cm}$  und einem Diffusionskoeffizient von  $D_{\perp} \sim 10^4 \,\mathrm{cm}^2 \,\mathrm{s}^{-1}$  sowie einer Fluidgeschwindigkeit von  $u_{\parallel} \sim 10^6 \,\mathrm{cm} \,\mathrm{s}^{-1}$  gilt:

$$\tau_{\rm diff} = \frac{\Delta L^2}{D_\perp} \sim 10^{-2} \,\mathrm{s} \tag{2.8}$$

$$\tau_{\rm conv} = \frac{\Delta L}{u_{\parallel}} \sim 10^{-5} \,\mathrm{s.} \tag{2.9}$$

Angeregte Zustände können deshalb hinsichtlich des Grundzustandes<sup>1</sup> als lokal relaxiert betrachtet werden. Ionisation und Rekombination laufen hingegen auf einer vergleichbaren Zeitskala ab wie Transportprozesse, weshalb die Entwicklung eines Ladungszustandes Z im Plasma durch Transportgleichungen (s. Kapitel 3) bestimmt werden muss.

Im Folgenden werden zwei Modelle beschrieben, in denen effektive Raten für Ionisation

$$R_{Z \to Z+1}^{(\text{ion})} = n_e n_Z \mathcal{R}_Z^{(\text{ion})}, \qquad (2.10)$$

Rekombination

$$R_{Z \to Z-1}^{(\text{rec})} = n_e n_Z \mathcal{R}_Z^{(\text{rec})}$$
(2.11)

und totale abgestrahlte Energie

$$P_{\mathrm{rad},Z} = n_e \, n_Z \, \mathcal{P}_Z^{(\mathrm{rad})} \tag{2.12}$$

eines Ladungszustandes Z einer Atomsorte berechnet werden. Durch die Angabe der effektiven Ratenkoeffizienten kann die Modellierung von sehr schnellen atomaren Prozessen von Transportprozessen im Plasma entkoppelt werden, wobei dennoch der Einfluss von angeregten Zuständen implizit berücksichtigt wird.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Genauer: hinsichtlich des Grundzustandes oder eines metastabilen Zustandes. In numerischen Transportrechnungen wird aber oft nur der Grundzustand betrachtet und angenommen, dass auch die metastabilen Zustände lokal im Gleichgewicht sind, obwohl dies streng genommen bei den Zeitskalen aus Gl. (2.8) und Gl. (2.9) falsch ist.

### 2.2.1 Korona-Modell

Das Korona-Modell<sup>2</sup> beschreibt ein optisch dünnes Plasma bei niedrigen Dichten, wie es auch in der Korona der Sonne vorkommt [39]. Elektronische Anregung und Ionisation wird nur durch Stöße mit Elektronen ausgelöst, wohingegen elektronische Abregung und Rekombination über Photoemission ablaufen. Diese Photonen verlassen in der optisch dünnen Näherung das Plasma und werden nicht reabsorbiert.

Die Besetzung der angeregten Zustände ergibt sich aus der Korona-Bilanz und ist nur von einem Ratenkoeffizienten (Anregung) und einem Einsteinkoeffizienten (Abregung), also nur von  $T_e$  abhängig. Die effektiven Korona-Ratenkoeffizienten sind deshalb ebenfalls nur von  $T_e$  abhängig:

$$\mathcal{R}_Z^{(X, \text{ Corona})} = \mathcal{R}_Z^{(X, \text{ Corona})}(T_e).$$

### 2.2.2 Stoß-Strahlungs-Modell

Im Gegensatz zum Korona-Modell werden im Stoß-Strahlungs-Modell (CR-Modell) Ionisation aus angeregten Zuständen sowie Stoß-Abregung und Dreikörperrekombination<sup>3</sup> berücksichtigt, wobei das Plasma nach wie vor als optisch dünn angenommen wird. Das lokale Stoß-Strahlungs-Gleichgewicht ist deshalb durch  $T_e$  und  $n_e$  bestimmt, was ebenfalls auch für die CR-Ratenkoeffizienten gilt:

$$\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{X, CR})} = \mathcal{R}_Z^{(\mathrm{X, CR})}(T_e, n_e).$$

Eine genaue Beschreibung der Kondensation von Übergangsraten zwischen beliebigen Zuständen auf effektive Übergangsraten der Grundzustände ist z.B. in [40] zu finden. Im Grenzfall kleiner Dichten ergeben sich daraus die Korona-Raten:

$$\mathcal{R}_Z^{(X, \text{ Corona})}(T_e) = \lim_{n_e \to 0} \mathcal{R}_Z^{(X, \text{ CR})}(T_e, n_e)$$
(2.13)

### 2.3 Implementierung in den EMC3-Code

Die Berechnung von Ratenkoeffizienten im EMC3-Code basierte bislang auf einem Korona-Modell und ist dieselbe, wie sie auch schon im STRAHL-Code

 $<sup>^{2}</sup>$ Gelegentlich wird unter Korona-Modell (enger als hier) ein Modell basierend auf denselben Annahmen, aber unter Vernachlässigung von Transport, verstanden. Bei Berücksichtigung von Transport sprechen diese Autoren schon von *non-Korona-Modell*. In dieser Arbeit wird immer auch Transport berücksichtigt.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Bei der Dreikörperrekombination wird die überschüssige Energie von einem weiteren Stoßpartner (Elektron) mitgenommen, wohingegen diese bei der Strahlungsrekombination in Form eines Photons abgestrahlt wird.

[2] verwendet wurde. Die STRAHL-Koeffizienten sind durch einen analytischen Fit-Ausdruck gegeben, der über eine Reihe von Fit-Koeffizienten an Daten für Ionisation, Rekombination und Linienstrahlung angepasst wurde. Diese Koeffizienten sind für jeden Ladungszustand Z einer Atomsorte tabelliert und werden im EMC3-Code aus einer Datei eingelesen. Die genaue Form dieser Fit-Ausdrücke ist [2] zu entnehmen.

### 2.3.1 Das ADAS-Projekt

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der EMC3-Code um das "Verallgemeinerte" Stoss-Strahlungs Modell [40] der ADAS-Datenbank[1] erweitert. ADAS (Atomic Data and Analysis Structure, Version 96) ist ein Verbund aus Computerprogrammen und Datensammlungen zur Modellierung von Stoß-Strahlungs-Prozessen von Atomen und Ionen im Plasma. Die ursprüngliche Version (ADAS 89) ist identisch mit dem Modell aus dem STRAHL-Code.

Die ADAS-Datenbank stellt effektive Ratenkoeffizienten für Ionisation, Rekombination und Ladungsaustausch

$$\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{ion, CR})}, \mathcal{R}_Z^{(\mathrm{rec, CR})}, \mathcal{R}_Z^{(\mathrm{cx, CR})}$$

sowie für normale Linienstrahlung und Linienstrahlung, die bei Rekombination oder Ladungsaustausch in einen angeregten Zustand ausgelöst wird,

$$\mathcal{P}_Z^{(\text{line, CR})}, \mathcal{P}_Z^{(\text{rec, CR})_4}, \mathcal{P}_Z^{(\text{cx, CR})}$$

in tabellierter Form abhängig von  $T_e$  und  $n_e$  im Format ADF11 [1] bereit. Ebenso werden Photoemissionskoeffizienten für spezielle Linien im Format ADF15 bereitgestellt Diese ermöglichen einen Vergleich mit experimentell gemessenen Strahlungsverteilungen (s. Kapitel 5.1.8 auf Seite 73).

Zu Beginn des Programmablaufs des EMC3-Codes werden die tabellierten Ratenkoeffizienten  $\mathcal{R}^{(X)}$  eingelesen und bei Bedarf bei  $T_e$  und  $n_e$  über eine bilineare Interpolation bestimmt<sup>5</sup>. Seien  $T_e^{(1)}$ ,  $T_e^{(2)}$  bzw.  $n_e^{(1)}$ ,  $n_e^{(2)}$  vorgegebene Temperaturen und Dichten, bei denen  $\mathcal{R}^{(X)}$  vorliegt, dann ist  $\mathcal{R}^{(X)}(T_e, n_e)$ durch

$$\log R(T_e, n_e) = c_1 + c_2 \log T_e + c_3 \log n_e + c_4 \log T_e \log n_e \qquad (2.14)$$

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Dieser Ratenkoeffizient enthält weiterhin Beiträge durch Bremsstrahlung, welche in der Plasmarandschicht aber vergleichsweise klein ausfallen. Im vollionisierten Kernplasma von Fusionsexperimenten liegt hingegen fast ausschließlich Bremsstrahlung (und sog. Synchrotonstrahlung) vor.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Wegen der starken  $T_e$ -Abhängigkeit hier allerdings bilinear bezüglich  $\log \mathcal{R}^{(X)}(\log T_e, \log n_e).$ 

gegeben, wobei die Koeffizienten  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $c_3$  und  $c_4$  allein durch  $R(T_e^{(i)}, n_e^{(j)})$ mit i, j = 0, 1 bestimmt sind (s. Anhang C.1). Außerhalb des Interpolationsgebietes

$$T_e \in [0.2 \,\mathrm{eV}, 15 \,\mathrm{keV}], \qquad n_e \in [5 \cdot 10^7 \,\mathrm{cm}^{-3}, 2 \cdot 10^{15} \,\mathrm{cm}^{-3}]$$
 (2.15)

werden konstante Ratenkoeffizienten angenommen. Für typische TEXTOR-Bedingungen in der Randschicht ( $T_e \approx 50 \,\mathrm{eV}, n_e \approx 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$ ) ist diese Randbedingung von untergeordneter Bedeutung, lediglich für numerische Rechnungen kann dies wichtig werden.

Aufgrund der Monte-Carlo-Natur des Lösungsverfahrens im EMC3-Code kann es passieren, dass nur wenige Teilchen an den äußeren Rand des Simulationsgebietes gelangen und somit dort die berechneten  $n_e$  oder  $T_e$  in einzelnen Gitterzellen aufgrund statistischer Ungenauigkeiten klein sein können. Da  $\mathcal{P}_Z^{(\text{rec})}$  an der unteren  $T_e$ -Grenze eine negative Steigung hat (s. Abb. 2.3), würde eine einfache Extrapolation zu niedrigeren  $T_e$  dazu führen, dass  $\mathcal{P}_Z^{(\text{rec})}$ weiter ansteigt. Dadurch würde die Gitterzelle weiter gekühlt, was letztendlich zu einer lokalen Divergenz führt und unphysikalisch ist. Aus numerischen Gründen ist es daher unbedingt notwendig, eine geeignete Randbedingung, wie z.B. konstante Koeffizienten, zu wählen. Aus physikalischer Sicht ist dies gerechtfertigt, denn die Gitterzellen, die im Rahmen der numerischen Behandlung außerhalb des Interpolationsbereichs fallen können, liegen in Bereichen mit niedrigem  $T_e$  und  $n_e$ , die einen vernachlässigbaren Einfluss auf das Simulationsgebiet haben.

Die Abhängigkeit von  $T_i$  kann, wie in Abschnitt 2.1.1 beschrieben, bei Stößen mit Elektronen vernachlässigt werden. Bei Ladungsaustausch mit neutralem Wasserstoff ist dies jedoch nicht der Fall. Für einen einzelnen Übergang  $i \to j$  gilt nach Gl. (2.6)

$$\mathcal{R}_{i\to j}^{(\mathrm{cx, CR})} = \mathcal{R}_{i\to j}^{(\mathrm{cx, CR})}(T_{in}).$$

Allerdings hängt die Besetzung angeregter Zustände von  $n_e$  und  $T_e$  ab, so dass

$$\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{cx, CR})} = \mathcal{R}_Z^{(\mathrm{cx, CR})}(T_e, n_e, T_{in})$$

für den effektiven Koeffizienten des gesamten Ladungszustandes Z gilt. Bei der Berechnung von  $\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{cx, CR})}$  in ADAS kann jedem Temperaturwert  $T_e^{(i)}$  ein Temperaturwert  $T_i^{(i)}$  und  $T_n^{(i)}$  zugewiesen werden, so dass die Ratenkoeffizienten formal nur noch von  $T_e$  abhängen. Die vorberechneten und tabellierten Werte für  $\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{cx, CR})}$  und  $\mathcal{P}_Z^{(\mathrm{cx, CR})}$  wurden jedoch bei  $T_e^{(i)} = T_i^{(i)} = T_n^{(i)}$  ausgewertet, was streng genommen bei den Rechnungen mit EMC3-EIRENE nicht gültig ist. Bei niedriger Neutralteilchenenergie  $E_N \leq 10 \,\mathrm{eV}$  ist die dabei entstehende Abweichung jedoch gering und nur für  $T_e \leq 1 \,\mathrm{eV}$  relevant, wie anhand von  $\mathcal{R}_{\mathrm{C3+}}^{(\mathrm{cx, CR})}$  aus [33] hervorgeht.

### 2.4 Vergleich der Modelle

Für einen Vergleich zwischen Korona- und CR-Modell sind im Folgenden Ratenkoeffizienten in beiden Modellen gezeigt. Die Korona-Koeffizienten  $\mathcal{R}_Z^{(X, \text{ Corona})}$  ergeben sich aus Gl. (2.13), indem  $\mathcal{R}_Z^{(X, \text{ CR})}$  bei niedrigster tabellierter Dichte  $n_e = 5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$  ausgewertet wird. Zum Vergleich sind auch die älteren Korona-Koeffizienten aus dem STRAHL-Code  $\mathcal{R}_Z^{(X, \text{ STRAHL})}$  eingezeichnet.

### Ionisationsraten

Zur Ionisation eines angeregten Atoms ist weniger Energie nötig, da das Elektron im angeregten Zustand schwächer gebunden ist. Mit zunehmendem  $n_e$  sind angeregte Zustände stärker besetzt, weshalb auch  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, CR})}$  höher ist (s. Abb. 2.1). Dies ist besonders bei niedrigen  $T_e$  relevant ist, denn dort haben nur wenige Elektronen genügend Energie, um ein Atom direkt aus dem Grundzustand zu ionisieren. Im Gegensatz dazu haben jedoch viele Elektronen genügend Energie um ein Atom anzuregen, weshalb ein zweites Elektron das angeregte Atom nach einem weiteren Stoß leicht ionisieren kann.

Abb. 2.1 zeigt  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, CR})}$  für zwei verschiedene  $n_e$  im Vergleich zu den älteren Koeffizienten  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, STRAHL})}$ . Für typische TEXTOR-Bedingungen in der Randschicht ( $T_e \approx 50 \text{ eV}, n_e \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ) ist  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, CR})}$  in folgender Tabelle zusammen mit den Korona-Koeffizienten  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, Corona})}$  (s.o.) aufgelistet.

Ionensorte	$\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{ion, \ Corona)}} [\mathrm{cm}^3 \mathrm{s}^{-1}]$	$\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{ion, CR})}  [\mathrm{cm}^3  \mathrm{s}^{-1}]$
$C^{0+}$	$7.49 \cdot 10^{-8}$	$8.68 \cdot 10^{-8}  (+16\%)$
$C^{1+}$	$2.02 \cdot 10^{-8}$	$2.18 \cdot 10^{-8}$ (+8%)
$C^{2+}$	$3.53 \cdot 10^{-9}$	$4.53 \cdot 10^{-9}$ (+23%)
$C^{3+}$	$7.30 \cdot 10^{-10}$	$8.13 \cdot 10^{-10}  (+11\%)$
$C^{4+}$	$5.28 \cdot 10^{-14}$	$8.98 \cdot 10^{-14}  (+70\%)$
$C^{5+}$	$4.00 \cdot 10^{-15}$	$4.51 \cdot 10^{-15}  (+13\%)$

Die Abweichungen zwischen  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, Corona})}$  und  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, STRAHL})}$  können dadurch erklärt werden, dass die Ratenkoeffizienten im STRAHL-Code auf älteren Daten basieren. Die starken Abweichungen bei  $T_e \gtrsim 1 \text{ keV}$  (Abb. 2.1 oben und Mitte links) sind aber wegen  $T_e \lesssim 100 \text{ eV}$  in der Randschicht von TEXTOR für die Berechnungen in dieser Arbeit nicht relevant.



Abbildung 2.1: Ratenkoeffizienten für Ionisation von Kohlenstoff  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, CR})}$ bei  $n_e = 5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$  und  $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  sowie  $\mathcal{R}_Z^{(\text{ion, STRAHL})}$  als Funktion von  $T_e$ .

### Rekombinationsraten

Ratenkoeffizienten für Rekombination enthalten auch im Korona-Modell des STRAHL-Codes einen Beitrag durch dielektronische Rekombination<sup>6</sup>, weshalb auch diese  $n_e$  abhängig sind.

 $\mathcal{R}_Z^{(\text{rec, CR})}$  enthält zusätzlich Beiträge durch Dreikörperrekombination, wes-

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Rekombination in einen hoch angeregten Zustand (n > 20), bei der ein zweites Elektron mit der überschüssigen Energie resonant angeregt wird. Je nach  $n_e$  zerfällt dieser Zustand unter Emission von zwei Photonen (dielektronische Rekombination) oder durch Re-Emission eines Elektrons (Autoionisation) [22].



Abbildung 2.2: Ratenkoeffizienten für Rekombination von Kohlenstoff  $\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{rec,\ CR})}$  (durchgezogene Linie) und  $\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{rec,\ STRAHL})}$  (unterbrochene Linie) bei  $n_e = 5\cdot 10^7 \,\mathrm{cm^{-3}}$  und  $10^{13} \,\mathrm{cm^{-3}}$  als Funktion von  $T_e$ .

halb  $\mathcal{R}_Z^{(\text{rec, CR})}$  bei niedrigem  $T_e$  und hohem  $n_e$  stark ansteigt (s. Abb. 2.2). Dies kann bei  $T_e = 1 \text{ eV}$  etwa eine Größenordnung ausmachen. Bei mittleren und hohen  $T_e$  dominiert dagegen dielektronische Rekombination, welche im STRAHL-Modell offensichtlich unterschätzt wird (s. Abb. 2.2 oben links, Mitte rechts und unten links).

Auffällig ist die große Diskrepanz in den Ratenkoeffizienten für C<sup>2+</sup> und C<sup>3+</sup>, was vermutlich an fehlerhaften Daten in einem der beiden Modelle liegt. Es sieht danach aus, als ob für diese Ratenkoeffizienten im CR-Modell die dielektronische Rekombination nicht berücksichtigt wurde. Da Rekombination für diese Übergänge nur für  $T_e \lesssim 5 \,\mathrm{eV}$  relevant wird (vgl. Abb. 2.1 und Abb.

2.2, man beachte aber die um 2 Größenordnungen verschobene Ordinate), ist dies bei Rechnungen für TEXTOR nicht weiter von Bedeutung.

### Strahlungsraten

Die Berücksichtigung von Stoß-Abregung im CR-Modell führt zu einer Verringerung von  $\mathcal{P}_Z^{(\text{line, CR})}$  bei höherem  $n_e$  (s. Abb. 2.3). Diese  $n_e$ -Abhängigkeit ist aber nur bei den unteren Ladungszuständen C<sup>1+</sup> und C<sup>2+</sup> ausgeprägt. Für typische TEXTOR-Bedingungen in der Randschicht ( $T_e \approx 50 \text{ eV}, n_e \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ) zeigt folgende Tabelle einen Vergleich:

Ionensorte	$\mathcal{P}_Z^{(\text{line, Corona})} \left[ \mathrm{eV  cm^3  s^{-1}} \right]$	$\mathcal{P}_Z^{({ m line, CR})}  [{ m eV}{ m cm}^3{ m s}^{-1}]$
$C^{1+}$	$1.16 \cdot 10^{-6}$	$1.12 \cdot 10^{-6}  (-4\%)$
$C^{2+}$	$1.21 \cdot 10^{-6}$	$1.08 \cdot 10^{-6}  (-11\%)$

Für C<sup>1+</sup> bis C<sup>3+</sup> ist  $\mathcal{P}_Z^{(\text{rec, CR})}$  im Vergleich zu  $\mathcal{P}_Z^{(\text{line, CR})}$  vernachlässigbar klein (um mindestens drei Größenordnungen für TEXTOR-relevante Temperaturen und Dichten), für C<sup>4+</sup> und C<sup>5+</sup> (für C<sup>6+</sup> gibt es keine Linienstrahlung) gibt es allerdings  $T_e$ -Bereiche, in denen  $\mathcal{P}_Z^{(\text{rec, CR})}$  relevant wird, wie folgende Tabelle für typische TEXTOR-Bedingungen in der Randschicht (s.o.) zeigt:

Ionensorte	$\mathcal{P}_Z^{(\mathrm{line, CR})}  [\mathrm{eV}  \mathrm{cm}^3  \mathrm{s}^{-1}]$	$\mathcal{P}_Z^{(\mathrm{rec,\ CR)}}  [\mathrm{eV}  \mathrm{cm}^3  \mathrm{s}^{-1}]$
$C^{4+}$	$8.27 \cdot 10^{-10}$	$0.95 \cdot 10^{-10}  (-89\%)$
$C^{5+}$	$1.37 \cdot 10^{-10}$	$2.21 \cdot 10^{-10}  (+61\%)$

In Abb. 2.3 fällt eine deutliche Abweichung zwischen  $\mathcal{P}_Z^{(\text{line, Corona})}$  und  $\mathcal{P}_Z^{(\text{line, STRAHL})}$  auf, welche vermutlich in der Einfachheit des Fit-Ausdrucks im STRAHL-Code begründet ist. Das führt in Kapitel 5 dazu, dass die Strahlungsverluste in den Rechnungen im Korona-Modell des STRAHL-Codes stark überschätzt werden.

### Ladungsaustausch

Ratenkoeffizienten für Ladungsaustausch zwischen neutralem Wasserstoff und Kohlenstoffionen  $\mathcal{R}_Z^{(cx, CR)}$  können um mehrere Größenordnungen größer sein als die für Rekombination  $\mathcal{R}_Z^{(rec)}$  (s. Abb. 2.4), was für typische Bedingungen in der Randschicht von TEXTOR (s.o.) noch einmal anhand von  $C^{1+}$  und  $C^{5+}$  in folgender Tabelle zu sehen ist<sup>7</sup>:

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Ladungsaustauschraten von STRAHL/ADAS 89 lagen nicht vor, deshalb sind hier sind nur die neuen Daten aus ADAS 96 zu sehen.



Abbildung 2.3: Ratenkoeffizienten für normale Linienstrahlung  $\mathcal{P}_Z^{(\text{line, CR})}$  (durchgezogene Linie) und Linienstrahlung nach einer Rekombination  $\mathcal{P}_Z^{(\text{rec, CR})}$  (unterbrochene Linie) bei  $n_e = 5 \cdot 10^7 \,\text{cm}^{-3}$  und  $n_e = 10^{13} \,\text{cm}^{-3}$  sowie  $\mathcal{P}_Z^{(\text{line, STRAHL})}$  als Funktion von  $T_e$ .

Ionensorte	$\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{rec,\ CR})}[\mathrm{cm}^3\mathrm{s}^{-1}]$	$\mathcal{R}_Z^{(\mathrm{cx, CR})}  [\mathrm{cm}^3  \mathrm{s}^{-1}]$
$C^{1+}$	$1.16 \cdot 10^{-13}$	$4.02 \cdot 10^{-11}$
$C^{5+}$	$1.09 \cdot 10^{-12}$	$2.45 \cdot 10^{-8}$

Auffällig ist, dass die  $n_e$ -Abhängigkeit nur für C<sup>1+</sup> (schwach) und für C<sup>2+</sup> ausgeprägt (s. Abb. 2.4 oben) ist. Da in die Prozessraten Gl. (2.1) zusätzlich noch die Dichten der beteiligten Teilchen eingehen und meist  $n_{\rm H} \ll n_e$  gilt, kann nicht ohne Weiteres bestimmt werden, welcher der beiden Prozesse dominiert (s. Kapitel 5.4 auf Seite 92).



Abbildung 2.4: Ratenkoeffizienten für Ladungsaustausch zwischen Kohlenstoffionen und neutralem Wasserstoff  $\mathcal{R}_Z^{(cx, CR)}$  bei  $n_e = 5 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$  und  $n_e = 1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  als Funktion von  $T_e$ . Zum Vergleich ist noch einmal  $\mathcal{R}_Z^{(\text{rec, CR})}$  bei  $n_e = 1 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  eingezeichnet.

### Kapitel 3

### Plasma-Modellierung

In diesem Kapitel werden die Modellgleichungen des EMC3-Codes für ein verunreinigtes Plasma hergeleitet. Das Plasmamodell des EMC3-Codes basiert auf den Flüssigkeitsgleichungen nach Braginskii (auch Transport- oder Bilanzgleichungen genannt) [4]. Diese beschreiben ein stoßdominiertes und magnetisiertes  $(\omega \tau \gg 1)^1$  Plasma, wie es in der Randschicht von Fusionsexperimenten vorzufinden ist. Bilanzgleichungen werden zunächst für ein Vielkomponenten-Plasma beliebiger Konzentrationen aufgestellt und danach in der Approximation des EMC3-Codes für ein schwach verunreinigtes Plasma modifiziert.

### 3.1 Fluidbeschreibung des Plasmas

Die Bilanzgleichungen, welche Braginskii für eine Teilchenspezies angegeben hat [4], lassen sich auch allgemein als Gleichungssystem für mehrere Teilchenspezies angeben. Die Herleitung ist in [18] für eine Ionensorte gezeigt, läßt sich aber ohne Probleme auf ein System aus mehreren Spezies verallgemeinern. Für eine Teilchensorte a mit Masse  $m_a$  und Ladungszahl  $Z_a$  lauten die Bilanzgleichungen im stationären Zustand ( $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ ):

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Für  $n \approx 5 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T \approx 50 \text{ eV}$  und  $B \approx 2 \text{ T}$  gilt  $\omega_i \tau_i \approx 2 \cdot 10^4$  und  $\omega_e \tau_e \approx 6 \cdot 10^5$ , wobei  $\omega_i$  und  $\omega_e$  die Gyrationsfrequenzen für Ionen und Elektronen sind und  $\tau_i$  und  $\tau_e$  die jeweiligen mittleren Stoßzeiten nach Braginskii.

### Teilchenbilanz

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( n_a \, u_{a\beta} \right) = S_a^{(p)} \qquad (3.1)$$

Impulsbilanz

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( m_a n_a u_{a\alpha} u_{a\beta} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \pi_{a\alpha\beta} + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} n_a T_a - Z_a e n_a \left( E_{\alpha} + \frac{1}{c} \left( \underline{u}_a \times \underline{B} \right)_{\alpha} \right) = S_a^{(m)}{}_{\alpha} \qquad (3.2)$$

### Energiebilanz

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{m_a n_a}{2} u_a^2 u_{a\beta} + \frac{5}{2} n_a T_a u_{a\beta} + u_{a\alpha} \pi_{\alpha\beta} + q_{a\beta} \right) - Z_a e n_a E_\beta u_{a\beta} = S_a^{(e)}, \quad (3.3)$$

wobei über den Index  $\beta$  summiert wird.  $n_a$  ist die Teilchendichte,  $u_{a\beta}$  die Fluidgeschwindigkeit,  $T_a$  die Temperatur,  $\pi_{a\alpha\beta}$  der Viskositätstensor und  $q_{a\beta}$  der Wärmefluss der Teilchenspezies a.  $E_{\alpha}$  und  $B_{\alpha}$  sind die Komponenten des elektrischen und magnetischen Feldes. Die Terme auf den rechten Seiten  $S_a^{(p)}$ ,  $S_a^{(m)}{}_{\alpha}$  und  $S_a^{(e)}$  beschreiben Quellen bzw. Senken in den Bilanzgleichungen aufgrund von Stößen mit anderen Teilchen der gleichen oder einer anderen Spezies.

### 3.1.1 Austauschterme

Stöße zwischen Teilchen können zu Impuls- und Energieaustausch zwischen verschiedenen Teilchenspezies führen. Über inelastische Stöße (Ionisation / Rekombination, s. Kapitel 2) kann auch ein Teilchenaustausch stattfinden.

#### Teilchenaustausch

Der Quellterm in der Teilchenbilanz ist allein durch Ionisations- und Rekombinations- (inkl. Ladungsaustausch) Raten gegeben (s. Kapitel 2). Die allgemeine Form lautet:

$$S_a^{(p)} = R_{Z_a-1\to Z_a}^{(\text{ion})} + R_{Z_a+1\to Z_a}^{(\text{rec})} - R_{Z_a\to Z_a+1}^{(\text{ion})} - R_{Z_a\to Z_a-1}^{(\text{rec})}$$
(3.4)

### Impulsaustausch

Der Impulsübertrag auf die Ionensorte a läßt sich in einen Anteil durch Coulombstöße zwischen geladenen Teilchen und einen Anteil durch Stöße mit Neutralteilchen aufteilen.

$$\underline{S}_{a}^{(m)} = \sum_{b} \underline{R}_{ab} + \underline{S}_{a}^{(m,N)}.$$
(3.5)

 $\underline{S}_{a}^{(m,N)}$  ist der Impulsübertrag bei Stößen mit Neutralteilchen und  $\underline{R}_{ab}$  ist der mittlere Impulsübertrag durch Coulombstöße zwischen Teilchen der Sorte a und b.  $\underline{R}_{ab}$  enthält sowohl einen Anteil durch Reibung  $\underline{R}_{ab}^{(\text{fric})}$  zwischen zwei Teilchenspezies als auch einen Anteil durch Thermokräfte  $\underline{R}_{ab}^{(\text{therm})}$ , welche in Anwesenheit eines Temperaturgradienten entstehen.

Der Reibungsterm ist gegeben durch (s. Anhang B für eine explizite Herleitung)

$$\underline{R}_{ab}^{(\text{fric})} = \mu_{ab} \, n_a \, \tau_{ab}^{-1} \, \left( \underline{u}_b \, - \, \underline{u}_a \right), \tag{3.6}$$

mit der reduzierten Masse

$$\mu_{ab} = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} \tag{3.7}$$

und der mittleren Stoßzeit zwischen Teilchen der Spezies a und b derselben Temperatur  $T = T_a = T_b$  (vgl. [4, Seite 277])

$$\tau_{ab}^{-1} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{\ln\Lambda n_b \, q_a^2 \, q_b^2}{\sqrt{\mu_{ab}} \, T^{3/2}}.$$
(3.8)

 $q_a,q_b$ sind die Ladungen der Teilchen a,b und  $\ln\Lambda$ ist der Coulomblogarithmus.

Thermokräfte werden durch vereinfachte Ansätze beschrieben, wie sie u.a. in [4, 39] zu finden sind, und werden für Stöße zwischen Ionen und Elektronen oder mit anderen Ionen getrennt behandelt. Thermokräfte durch Stöße zwischen der Ionensorte a und Elektronen sind durch

$$\underline{R}_{ae}^{(\text{therm})} = n_a c_e Z_a^2 \nabla T_e, \qquad c_e \equiv 0.71$$
(3.9)

und die zwischen zwei Ionensorten a, i durch

$$\underline{R}_{ai}^{(\text{therm})} = n_a \,\beta_{ai} \,\nabla T_i. \tag{3.10}$$

gegeben. Der Koeffizient  $\beta_{ai}$  ist durch [5] (für kleine Dichten  $n_a \ll n_i$ )

$$\beta_{ai} \equiv \frac{3\left(\mu + 5\sqrt{2}\left(Z_a/Z_i\right)^2 \left(1.1\,\mu^{5/2} - 0.35\,\mu^{3/2}\right) - 1\right)}{2.6 - 2\,\mu + 5.4\,\mu^2} \tag{3.11}$$

mit  $\mu \equiv \frac{m_a}{m_a + m_i}$  bestimmt. Oft wird auch ein weiter vereinfachter Koeffizient  $\beta_{ai} = 2.2 Z_a^2$  verwendet, wie z.B. im originalen B2-Code [3]. Dieselbe Form für Thermokräfte wird auch in Simulationen für KSTAR [26] angewandt.

In einer genaueren Behandlung [20, 19], die mittlerweile in den B2-Code übernommen wurde [32], werden Ausdrücke für Reibungs- und Wärmefluss-Koeffizienten in einem Vielkomponenten-Plasma vorgestellt, die Beiträge durch Thermokräfte implizit enthalten. Das dort beschriebene Verfahren hat gegenüber anderen (noch genaueren) Behandlungen (Berücksichtigung von höheren Momenten) den Vorteil, dass Wechselwirkungsterme zwischen zwei verschiedenen Ionensorten (der gleichen oder unterschiedlichen Teilchenspezies) zu effektiven Wechselwirkungstermen zwischen zwei Teilchenspezies zusammengefasst werden können. Dies ist besonders in numerischen Rechnungen von Vorteil und könnte daher z.B. in einem zukünftigen Projekt auch in den EMC3-Code übernommen werden.

### Energieaustausch

Der Energieübertrag auf die Ionensorte a wird ebenso wie der Impulsübertrag in einen Anteil durch Coulombstöße mit geladenen Teilchen und einen Anteil durch Stöße mit Neutralteilchen aufgeteilt.

$$S_a^{(e)} = \underbrace{\sum_{b} \left( u_{a\beta} R_{ab\beta} + Q_{ab} \right)}_{\equiv S_a^{(e,C)}} + S_a^{(e,N)}.$$
(3.12)

 $S_a^{(e,N)}$  ist der Energieübertrag aufgrund von Stößen mit Neutralteilchen und  $Q_{ab}$  ist die Wärme, die in den Teilchen der Spezies *a* durch Stöße mit Teilchen der Spezies *b* generiert wird (s. Anhang B). Für den Wärmeübertrag von Elektronen auf Ionen ergibt sich

$$Q_{ie} = \frac{3 m_e}{m_i} \frac{n_e}{\tau_{ei}} (T_e - T_i).$$
 (3.13)

### 3.1.2 Bilanzgleichungen

Mit den Austauschtermen aus Gl. (3.4), Gl. (3.5) und Gl. (3.12) werden die Bilanzgleichungen für Teilchen Gl. (3.1), Impuls Gl. (3.2) und Energie Gl. (3.3) im Folgenden für Ionen und Elektronen genauer betrachtet.

### Teilchenbilanz

Mit Hilfe der Neutralitätsbedingung

$$n_e = \sum_a q_a n_a \tag{3.14}$$

läßt sich die Elektronendichte  $n_e$  durch Summation über alle Ionensorten *a* aus deren Dichten bestimmen. Die Teilchenbilanz für eine Ionensorte *a* mit Ladung  $Z_a$  lautet unter Berücksichtigung von Ionisation und Rekombinationsprozessen (diese beinhalten hier auch Ladungsaustausch) (s. Kapitel 2):

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( n_a \, u_{a\beta} \right) = R_{Z_a - 1 \to Z_a}^{(\text{ion})} + R_{Z_a + 1 \to Z_a}^{(\text{rec})} - R_{Z_a \to Z_a + 1}^{(\text{ion})} - R_{Z_a \to Z_a - 1}^{(\text{rec})}$$
(3.15)

### Impulsbilanz

In der Impulsbilanz der Ionen Gl. (3.2) kann der explizite Ausdruck für das elektrische Feld mit Hilfe der Impulsbilanz der Elektronen ersetzt werden. Diese lautet für die Komponente parallel zum Magnetfeld unter Vernachlässigung von inertialen und viskosen Beiträgen ( $m_e \ll m_i$ ):

$$\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_e T_e + e n_e E_{\parallel} = \sum_a R_{ea} + S_e^{(m,N)}$$
(3.16)

Der Index || wird hier und im Folgenden an den Reibungstermen  $R_{ab}$  und Quelltermen  $\underline{S}_{a}^{(m,N)}$  weggelassen. Gl. (3.16) kann nun direkt nach dem elektrischen Feld aufgelöst

$$e E_{\parallel} = \frac{1}{n_e} \left[ -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_e T_e + \sum_a R_{ea} + S_e^{(m,I)} \right]$$
(3.17)

21

und in die parallele Komponente der Impulsbilanz der Ionensorte $\boldsymbol{a}$ eingesetzt werden.

$$S_{a}^{(m)} = \sum_{b} R_{ab} + S_{a}^{(m,N)}$$

$$= \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( m_{a} n_{a} u_{a\parallel} u_{a\beta} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \pi_{a\parallel\beta} + \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_{a} T_{a}$$

$$- \frac{Z_{a} n_{a}}{n_{e}} \left( -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_{e} T_{e} + \sum_{b} R_{eb} + S_{e}^{(m,N)} \right) \qquad (3.18)$$

Durch Zusammenfassung der Beiträge mit  $\frac{\partial}{\partial x_{\beta}}, \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}}$  und  $\sum_{b}$  ist eine Umformung auf folgende Form möglich:

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( m_a n_a u_{a\parallel} u_{a\beta} + \pi_{a\parallel\beta} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( n_a T_a + Z_a n_a T_e \right) + \sum_b \left( R_{ab} + \frac{Z_a n_a}{n_e} R_{eb} \right) + \left( S_a^{(m,N)} + \frac{Z_a n_a}{n_e} S_e^{(m,N)} \right) (3.19)$$

### Energiebilanz

Für alle Ionen kann wegen der ähnlichen Masse (im Vergleich zu Elektronen) eine gemeinsame Temperatur  $T_i$  angenommen werden. Es müssen daher nur zwei Energiebilanzen gelöst werden. Zur Bestimmung der Ionentemperatur  $T_i$  wird über alle Energiebilanzen der Ionen summiert. Dies ergibt

$$\sum_{a} \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{m_{a} n_{a}}{2} u_{a}^{2} u_{a\beta} + \frac{5}{2} n_{a} T_{i} u_{a\beta} + u_{a\alpha} \pi_{\alpha\beta} + q_{a\beta} \right)$$
$$- E_{\beta} \underbrace{\sum_{a} Z_{a} e n_{a} u_{a\beta}}_{= j_{i\beta}} = \sum_{a} \left( S_{a}^{(e,C)} + S_{a}^{(e,I)} \right)$$
(3.20)

mit der Ionenstromdichte

$$j_{i\beta} \equiv \sum_{a} Z_{a} e \, n_{a} \, u_{a\beta}. \tag{3.21}$$

In der Summe über  $S_a^{(e,C)}$  auf der rechten Seite heben sich die Energieüberträge zwischen Ionen weg, wenn über alle Ionen summiert wird. Es bleibt der Energieübertrag zwischen Elektronen und Ionen:

$$\sum_{a} S_a^{(e,C)} = \sum_{a} \left( \underline{u}_a \cdot \underline{R}_{ae} + Q_{ae} \right) = -S_e^{(e,C)}.$$
(3.22)

Dieser steht auch entsprechend mit anderem Vorzeichen in der Energiebilanz der Elektronen:

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{m_e n_e}{2} u_{e^2} u_{e\beta} + \frac{5}{2} n_e T_e u_{e\beta} + u_{e\alpha} \pi_{\alpha\beta} + q_{e\beta} \right) - E_{\beta} \underbrace{(-e) n_e u_{e\beta}}_{= j_{e\beta}} = S_e^{(e,C)} + S_e^{(e,N)}$$
(3.23)

Die Modellgleichungen des EMC3 basieren auf den hier beschriebenen Bilanzgleichungen für Teilchen Gl. (3.15), Impuls Gl. (3.19) und Energie Gl. (3.20) bzw. Gl. (3.23) in der Näherung eines schwach verunreinigten Plasmas, welche im folgenden Abschnitt beschrieben wird.

### 3.2 Das Plasmamodell des EMC3-Codes

Die Modellgleichungen des EMC3-Codes beschreiben einen stationären Zustand  $(\frac{\partial}{\partial t} = 0)$  in der Approximation eines schwach verunreinigten Plasmas (trace impurity model), d.h

$$n_i \approx n_e \quad \text{und} \quad n_a \ll n_i,$$
 (3.24)

wobei mit  $n_a^2$  die Dichte einer beliebigen Verunreinigungssorte gemeint ist. Der Index *i* steht im Folgenden immer für H<sup>+</sup>-Ionen. Der wichtigste Einfluss von Verunreinigungen im Plasma sind in dieser Näherung Energieverluste durch Strahlung, während eine Verdünnung des Plasmas vernachlässigbar ist. Strahlungsverluste sind zur Zeit auch die einzigen Effekte von Verunreinigungen, die im EMC3-Code berücksichtigt werden [10]. In der Energiebilanz der Elektronen beschreibt der Term  $S_e^{(\text{cool})}$  die Kühlung der Elektronen aufgrund von inelastischen Stößen mit Verunreinigungsionen (Anregung oder Ionisation).

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen gilt fast immer  $\frac{n_a}{n_i} \lesssim 10^{-2}$  und für C<sup>5+</sup> und C<sup>6+</sup> sogar  $\frac{n_a}{n_i} \lesssim 10^{-3}$ .

Senkrechter Teilchenfluss  $\Gamma_{a\perp}$ , viskoser Impulsübertrag der Komponente parallel zum Magnetfeld  $\pi_{a\parallel\beta}$  und Wärmeflussdichte  $q_{a\beta}$  werden durch diffusive Ansätze beschrieben.

$$\Gamma_{a\perp} = n_a u_{a\perp} = -D_{a\perp} \frac{\partial n_a}{\partial x_\perp}$$
(3.25)

$$\pi_{a\parallel\parallel} = -\eta_{a\parallel} \frac{\partial u_{a\parallel}}{\partial x_{\parallel}} \tag{3.26}$$

$$\pi_{a\parallel\perp} = -\eta_{a\perp} \frac{\partial u_{a\parallel}}{\partial x_{\perp}} \tag{3.27}$$

$$q_{a\parallel} = -\kappa_{a\parallel} \frac{\partial T_a}{\partial x_{\parallel}} \tag{3.28}$$

$$q_{a\perp} = -\kappa_{a\perp} \frac{\partial T_a}{\partial x_\perp}, \quad \kappa_{a\perp} \equiv \chi_{a\perp} n_a$$
 (3.29)

Die Koeffizienten für den parallelen Transport  $\eta_{i\parallel}, \kappa_{e\parallel}$  und  $\kappa_{i\parallel}$  sind die klassischen nach Braginskii [4]

$$\eta_{i\parallel} = 0.96 \, n_i \, T_i \, \tau_i \tag{3.30}$$

$$\kappa_{e\parallel} = 3.16 \frac{n_e T_e \tau_e}{m_e} \tag{3.31}$$

$$\kappa_{i\parallel} = 3.9 \, \frac{n_i \, T_i \, \tau_i}{m_i}, \qquad (3.32)$$

wohingegen die Koeffizienten für den anomalen senkrechten Transport  $D_{a\perp}$ ,  $\eta_{a\perp}$  und  $\chi_{a\perp}$  freie Inputparameter sind<sup>3</sup> (s. Tab. 4.2). Da der senkrechte Teilchenfluss in diesem Modell gegeben ist (s. Gl. (3.25)), braucht im EMC3-Code nur die parallele Komponente der Impulsbilanzgleichung gelöst werden.

In der Näherung des schwach verunreinigten Plasmas  $(n_a \ll n_i, \text{ Gl.}(3.24))$ werden Teilchen- und Impulsbilanzen für das Hauptplasma und für Verunreinigungen getrennt behandelt.

### 3.2.1 Modellierung des Hauptplasma

Ausgehend von den Bilanzgleichungen für Teilchen Gl. (3.15), Impuls Gl. (3.19) und Energie Gl. (3.20), Gl. (3.23) werden nun die Modellgleichungen des EMC3-Codes für Wasserstoffionen hergeleitet.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Im EMC3-Code wird  $\eta_{a\perp} = m_a n_a D_{a\perp}$  verwendet.

#### Teilchenbilanz

Die Gleichung für die Teilchenbilanz der H<sup>+</sup>-Ionen im EMC3-Code folgt aus Gl. (3.15), wenn dort der senkrechte Teilchenfluss aus Gl. (3.25) eingesetzt wird:

$$S_{i}^{(p)} = \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( n_{i} u_{i\parallel} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \left( n_{i} u_{i\perp_{1,2}} \right)$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( n_{i} u_{i\parallel} \right) - \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\perp_{1,2}}^{2}} \left( D_{i\perp} n \right)$$
(3.33)

Der Index <sub>1,2</sub> bedeutet, dass jeweils ein Term für beide Richtungen senkrecht zum Magnetfeld auftritt. Da die Form aber dieselbe ist, wird hier der Übersicht halber diese verkürzte Schreibweise angewandt<sup>4</sup>.  $S_i^{(p)}$  ist die Quellverteilung durch Ionisation von neutralem Wasserstoff<sup>5</sup>, welche von EIRENE berechnet und dem EMC3 in Form von Volumenquellen als Input übergeben wird.

#### Impulsbilanz

Mit  $n_i = n_e$  folgt aus Gl. (3.19) für die Impulsbilanz der H<sup>+</sup>-Ionen:

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( m_{i} n_{i} u_{i\parallel} u_{i\beta} + \pi_{i\parallel\beta} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_{i} \left( T_{i} + T_{e} \right) + \sum_{b} \left( R_{ib} + R_{eb} \right) + \underbrace{S_{i}^{(m,N)} + S_{e}^{(m,N)}}_{\equiv S^{(m,N)}}.$$
(3.34)

Die Impulsüberträge zwischen H<sup>+</sup>-Ionen und Elektronen heben sich wegen  $R_{ie} = -R_{ei}$  genau weg.  $R_{ei}$  tritt in Gl. (3.34) auf, weil das elektrische Feld in Gl. (3.18) mit Hilfe der Impulsbilanz der Elektronen Gl. (3.16) ersetzt wurde.  $S^{(m,N)}$  enthält den Impulsübertrag auf H<sup>+</sup>-Ionen durch Ionisation (H +  $e \rightarrow$  H<sup>+</sup> + 2e), Ladungsaustausch (H + H<sup>+</sup>  $\rightarrow$  H<sup>+</sup> + H) und Wechselwirkungen von Elektronen und H<sup>+</sup>-Ionen mit H<sub>2</sub> und H<sub>2</sub><sup>+</sup> Molekülen. Diese Beiträge werden von EIRENE berechnet und dem EMC3 als Input übergeben.

 $<sup>^4</sup>$ In einem krummlinigen Koordinatensystem treten jedoch Zusatzterme auf. Diese werden im EMC3 näherungsweise durch einen Korrekturterm berücksichtigt.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Rekombination von  $H^+$  ist bei den zu erwartenden Temperaturen in TEXTOR vernachlässigbar klein (Faktor  $10^{-4}$ ) und wird hier vernachlässigt, könnte aber in einer zukünftigen Arbeit leicht implementiert werden.

Werden in Gl. (3.34) die Impulsüberträge durch Wechselwirkung mit Verunreinigungen aufgrund der geringen Dichte  $n_a \ll n_{e,i}$  vernachlässigt (da  $R_{ab} \propto n_a n_b$ ), dann fällt die Summe in Gl. (3.34) weg.<sup>6</sup>

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( m_i n_i u_{i\parallel} u_{i\beta} + \pi_{i\parallel\beta} \right) = -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_i \left( T_i + T_e \right) + S^{(m,N)}$$
(3.35)

Mit dem senkrechten Teilchenfluss aus Gl. (3.25) und der Viskosität aus Gl. (3.26) wird die linke Seite von Gl. (3.35) zu:

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( m_{i} n_{i} u_{i\parallel} u_{i\beta} + \pi_{i\parallel\beta} \right) = \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( m_{i} n_{i} u_{i\parallel}^{2} - \eta_{i\parallel} \frac{\partial u_{i\parallel}}{\partial x_{\parallel}} \right) \\
+ \frac{\partial}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \underbrace{ \left( -m_{i} u_{i\parallel} D_{i\perp} \frac{\partial n_{i}}{\partial x_{\perp_{1,2}}} - m_{i} n_{i} D_{i\perp} \frac{\partial u_{i\parallel}}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \right)}_{= D_{i\perp} \frac{\partial}{\partial x_{\perp_{1,2}}} m_{i} n_{i} u_{i\parallel}} (3.36)$$

Daraus ergibt sich die Impulsbilanz für Wasserstoffionen im EMC3-Code:

$$\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( m_i n_i u_i_{\parallel}^2 - \eta_i \| \frac{\partial u_i_{\parallel}}{\partial x_{\parallel}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_{\perp 1,2}} D_{i\perp} \frac{\partial}{\partial x_{\perp 1,2}} m_i n_i u_{i\parallel}$$
$$= -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_i (T_i + T_e) + S^{(m,N)}.$$
(3.37)

#### Energiebilanz

Bei der Berechnung der Energiebilanz wird im EMC3 Stromfreiheit angenommen, was für die Plasmarandschicht eine brauchbare Näherung ist. Unter dieser Bedingung gilt:

$$0 = \underline{j} = \underline{j}_e + \underline{j}_i = -e n_e \underline{u}_e + \sum_a q_a n_a \underline{u}_a, \qquad (3.38)$$

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen haben jedoch gezeigt, dass die Summe der Reibungsterme lokal vor der DED-Oberfläche vom Betrag her um etwa den Faktor 2 größer sein können als der Druckgradient  $-\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_i (T_i + T_e)$ .

wobei die Summe über alle Ionensorten a läuft. Das Ohmsche Gesetz in starken Magnetfeldern, wie sie in Fusionsexperimenten vorzufinden sind, lautet [16] (small larmor radius approximation):

$$\underline{\underline{B}} + \underline{\underline{u}} \times \underline{\underline{B}} = \eta_r \underline{\underline{j}} = 0, \qquad (3.39)$$

mit

$$\underline{u} = \frac{\sum_{a} n_{a} m_{a} \underline{u}_{a}}{\sum_{a} n_{a} m_{a}} \tag{3.40}$$

für die Geschwindigkeit des Plasmas als Ganzes und  $\eta_r$  für die elektrische Resistivität des Plasmas. Im Falle eines schwach verunreinigten Plasmas  $(n_a \ll n_i, \text{Gl.}(3.24))$  und für  $m_i \ll m_e$  reduzieren sich die Ausdrücke für  $\underline{j}_i$  und  $\underline{u}$  zu

$$\underline{j}_i \approx e \, n_i \, \underline{u}_i, \qquad \underline{u} \approx \, \underline{u}_i. \tag{3.41}$$

Wenn man Gl. (3.39) mit  $\underline{j}_i$  bzw.  $\underline{j}_e = -\underline{j}_i$  multipliziert und diese genäherten Ausdrücke darin einsetzt, ergibt dies:

$$\underline{j}_i \cdot \underline{E} = -\underline{j}_e \cdot \underline{E} \approx 0, \qquad (3.42)$$

wodurch der Einfluss des elektrischen Feldes in Gl. (3.20) und Gl. (3.23) eliminiert wird. Bei beliebigen Verunreinigungskonzentrationen läßt sich der Einfluss des elektrischen Feldes nur eliminieren, falls der Ladungsfluss der Ionen ungefähr parallel zum Teilchenfluss verläuft ( $\underline{j}_i \parallel \underline{u}$ ). In der hier beschriebenen Näherung eines schwach verunreinigten Plasmas ist diese Näherung aber anwendbar. Mit einer weiteren Näherung<sup>7</sup>

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{m_a n_a}{2} u_a^2 u_{a\beta} + u_{a\alpha} \pi_{a\alpha\beta} \right) \ll \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{5}{2} n_a T_a u_{a\beta} + q_{a\beta} \right) \quad (3.43)$$

lautet die Energiebilanz der Ionen Gl. (3.20)

$$\sum_{a} \left( \underline{u}_{a} \cdot \underline{R}_{ae} + Q_{ae} + S_{a}^{(e,N)} \right) = \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{5}{2} T_{i} \sum_{a} n_{a} u_{a\beta} + \sum_{a} q_{a\beta} \right).$$
(3.44)

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>In einer aktuellen Dissertation werden z.Zt. diese Terme in die Bilanzgleichungen des EMC3-Codes eingebaut. Erste Untersuchungen haben jedoch die Anwendbarkeit dieser Näherung bestätigt.

Für ein schwach verunreinigtes Plasma reduzieren sich die Summen in Gl. (3.44) wegen  $n_a \ll n_i$  wieder auf den Summanden mit a = i. Mit  $\underline{j}_i \approx -\underline{j}_e$  gilt in dieser Näherung auch  $\underline{u}_i \approx \underline{u}_e$  und damit ist auf der rechten Seite von Gl. (3.44) wegen  $\underline{R}_{ie} \propto (\underline{u}_i - \underline{u}_e)$  auch dieser Term vernachlässigbar. Für die Energiebilanz der Ionen und Elektronen ergibt sich somit:

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{5}{2} T_i n_i u_{i\beta} + q_{i\beta} \right) = Q_{ie} + S_i^{(e,N)}$$
(3.45)

$$\frac{\partial}{\partial x_{\beta}} \left( \frac{5}{2} T_e n_i u_{i\beta} + q_{e\beta} \right) = -Q_{ie} + S_e^{(e,N)} - S_e^{(\text{cool})}. \quad (3.46)$$

 $S_i^{(e,N)}$  und  $S_e^{(e,N)}$  enthalten die Wechselwirkung mit neutralem H, H<sub>2</sub> sowie H<sub>2</sub><sup>+</sup> und werden von EIRENE berechnet. Mit dem Teilchenfluss aus Gl. (3.25), dem Wärmefluss aus Gln. (3.28 - 3.29),  $Q_{ie}$  aus Gl. (3.13) und der Abkürzung

$$k \equiv \frac{3\,m_e\,n_e}{m_i\,\tau_{ei}}\tag{3.47}$$

wird die Energiebilanz der Ionen im EMC3 zu

$$\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( \frac{5}{2} n_i T_i u_{i\parallel} - \kappa_{i\parallel} \frac{\partial T_i}{\partial x_{\parallel}} \right) 
+ \frac{\partial}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \left( -\frac{5}{2} T_i D_{i\perp} \frac{\partial n_i}{\partial x_{\perp_{1,2}}} - \chi_{i\perp} n_i \frac{\partial T_i}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \right) 
= S_i^{(e,N)} - k (T_i - T_e)$$
(3.48)

und die Energiebilanz der Elektronen zu

$$\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( \frac{5}{2} n_i T_e u_{i\parallel} - \kappa_{e\parallel} \frac{\partial T_e}{\partial x_{\parallel}} \right) 
+ \frac{\partial}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \left( -\frac{5}{2} T_e D_{i\perp} \frac{\partial n_i}{\partial x_{\perp_{1,2}}} - \chi_{e\perp} n_i \frac{\partial T_e}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \right) 
= S_e^{(e,N)} + k (T_i - T_e) - S_e^{(\text{cool})}.$$
(3.49)

### 3.2.2 Modellierung von Verunreinigungen

Verunreinigungen werden im EMC3-Code in einer stark vereinfachten Form behandelt. Viskose und inertiale (Impuls Quellterm) Beiträge sowie Stöße von Verunreinigungen mit Neutralteilchen und anderen Verunreinigungen werden aufgrund der geringen Dichten in der Impulsbilanz Gl. (3.19) vernachlässigt. Diese lautet somit<sup>8</sup>:

$$0 = -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} p_a + Z_a n_a e E_{\parallel} + \sum_{b=i,e} R_{ab}$$
(3.50)

und ist keine Differentialgleichung für  $u_{a\parallel}$  mehr! Wegen  $m_e \ll m_i$  kann zusätzlich auch die Reibung zwischen Elektronen und Verunreinigungsionen vernachlässigt werden. Nach Einsetzen der Ausdrücke für Reibungs- und Thermokräfte ergibt dies die Impulsbilanz von Verunreinigungen im EMC3 [13], [10]:

$$0 = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} p_{a}}_{F_{P}} + \underbrace{Z_{a} n_{a} e E_{\parallel}}_{F_{E}} + \underbrace{\frac{\mu_{ai} n_{a} \left(u_{i\parallel} - u_{a\parallel}\right)}{\tau_{ai}}}_{F_{R}} + \underbrace{n_{a} \beta_{ai} \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} T_{i}}_{F_{th,i}} + \underbrace{c_{e} n_{a} Z_{a}^{2} \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} T_{e}}_{F_{th,e}}.$$

$$(3.51)$$

Dies entspricht dem Kräftegleichgewicht aus Druck  $F_P$ , elektrischer Kraft  $F_E$ , Reibungskraft  $F_R$  und Thermokräften  $F_{th,i}$ ,  $F_{th,e}$ , wie es auch in [39] beschrieben wird. Die Vernachlässigbarkeit des inertialen Terms wird in [16] für Geschwindigkeiten viel kleiner als die Schallgeschwindigkeit gezeigt, was aber streng genommen für den Bereich etwa 1 cm vor der Wand nicht mehr gültig ist. Dies ist zwar nur ein schmaler Bereich im Simulationsgebiet, allerdings befindet sich dort auch die Verunreinigungsquelle. Aufgrund der Nichtlinearität der Transportgleichungen können diese kleinen Abweichungen zu Beginn aber zu erheblichen Abweichungen während des Verunreinigungstransportes führen. In einer zukünftigen Arbeit sollte daher der inertiale Term in den EMC3-Code eingebaut werden, was eine komplette Umstrukturierung des Programmteils zur Folge hat.

Die Annahme des Kräftegleichgewichts bewirkt, dass die Impulsbilanz keine Differentialgleichung mehr ist, sondern direkt nach  $u_{a\parallel}$  aufgelöst werden kann.

 $<sup>^8{\</sup>rm Zum}$  besseren Vergleich mit einer Kräftebilanz wird hier zunächst noch der explizite Ausdruck für das elektrische Feld beibehalten und erst weiter unten ersetzt.

$$u_{a\parallel} = u_{i\parallel} + \frac{\tau_{ai}}{\mu_{ab} n_a} \left[ F_P + F_E + F_{th,i} + F_{th,e} \right]$$
(3.52)

Um den expliziten Ausdruck für das elektrische Feld zu eliminieren, wird wieder die Impulsbilanzgleichung der Elektronen verwendet. In Gl. (3.17) wird dafür die Reibung zwischen Ionen und Elektronen (wegen  $m_e \ll m_i$ ) sowie die Wechselwirkung mit Neutralteilchen vernachlässigt. Dies ergibt für das elektrische Feld:

$$e E_{\parallel} = -\frac{1}{n_e} \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} p_e - c_e \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} T_e.$$
(3.53)

Wenn man zusätzlich den Druckgradienten in einen Temperatur- und einen Dichtegradienten aufteilt, folgt daraus für die Geschwindigkeit der Komponente a:

$$u_{a\parallel} = u_{i\parallel} + \frac{\tau_{ai}}{\mu_{ai}} \left[ c_e Z_a \left( Z_a - 1 \right) \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} T_e + \left( \beta_{ai} - 1 \right) \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} T_i - \frac{Z_a}{n_e} \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} p_e \right] - \frac{\tau_{ai}}{\mu_{ai} n_a} T_i \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_a$$

$$(3.54)$$

$$= u_{a\parallel}^{(\text{conv})} + u_{a\parallel}^{(\text{diff})}$$
(3.55)

Diese Gleichung kann in einen konvektiven  $u_{a\parallel}^{(\text{conv})}$  und einen diffusiven Anteil (bzgl. des Dichtegradienten)

$$u_{a\parallel}^{\text{(diff)}} = -\frac{1}{n_a} D_{\parallel} \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} n_a \qquad (3.56)$$

aufgeteilt werden, wobei der parallele Diffusionskoeffizient durch

$$D_{\parallel} \equiv \frac{\tau_{ai} T_i}{\mu_{ai}} \tag{3.57}$$

gegeben ist. Der Transport von Verunreinigungen kann jetzt mit Hilfe der Teilchenbilanz bestimmt werden, wenn dort  $u_{a\parallel}$  aus Gl. (3.55) eingesetzt wird.
### Verunreinigungstransport

Die Teilchenbilanz Gl. (3.15) für Verunreinigungen wird in einen Anteil parallel und senkrecht zum Magnetfeld aufgeteilt.

$$S_{a}^{(p)} = \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( n_{a} \, u_{a\parallel} \right) + \frac{\partial}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \left( n_{a} \, u_{a\perp_{1,2}} \right) \tag{3.58}$$

Mit dem parallelen Teilchentransport aus Gl. (3.55) und dem senkrechten aus Gl. (3.25) wird Gl. (3.58) zu

$$S_{a}^{(p)} = \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( n_{a} u_{a\parallel}^{(\text{conv})} + n_{a} u_{a\parallel}^{(\text{diff})} \right) - \frac{\partial}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \left( D_{\perp} \frac{\partial n_{a}}{\partial x_{\perp_{1,2}}} \right). \quad (3.59)$$

Mit ${u_a}_{\parallel}^{(\mathrm{diff})}$ aus Gl. (3.56) und

$$-D_{\parallel}\frac{\partial n_{a}}{\partial x_{\parallel}} = -\frac{\partial}{\partial x_{\parallel}}\left(D_{\parallel}n_{a}\right) + n_{a}\frac{\partial D_{\parallel}}{\partial x_{\parallel}}$$
(3.60)

kann Gl. (3.59) leicht zu

$$S_{a}^{(p)} = \frac{\partial}{\partial x_{\parallel}} \left( n_{a} u_{a\parallel}^{(\text{conv})} + n_{a} \frac{\partial D_{\parallel}}{\partial x_{\parallel}} \right) - \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\parallel}^{2}} \left( D_{\parallel} n_{a} \right) - \frac{\partial^{2}}{\partial x_{\perp_{1,2}}^{2}} \left( D_{\perp} n_{a} \right)$$
(3.61)

umgeformt werden und hat nun die allgemeine Form einer Fokker-Planck-Gleichung [36]

$$\nabla \cdot \left[ \underline{\mathcal{V}} \mathcal{F} - \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\mathcal{D}}} \mathcal{F} \right) \right] = \mathcal{S}$$
(3.62)

31

für die Verteilungsfunktion  $\mathcal{F} = n_a$  mit den Transportkoeffizienten

$$S = S_a^{(p)} \qquad \text{Quellterm}$$

$$\underline{\mathcal{V}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ u_a_{\parallel}^{(\text{conv})} + \frac{\partial D_{\parallel}}{\partial x_{\parallel}} \end{pmatrix} \qquad \text{Driftkoeffizient}$$

$$\underline{\underline{\mathcal{D}}} = \begin{pmatrix} D_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & D_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & D_{\parallel} \end{pmatrix} \qquad \text{Diffusionskoeffizient}$$

Der EMC3-Code löst Gl. (3.62) mit einem Monte-Carlo Verfahren [8]. Der Quellterm  $S_a^{(p)}$  ist in Gl. (3.4) für eine Ionensorte *a* mit Ladungszahl *Z* angegeben und enthält positive Quellen aufgrund von Ionisationen aus einem niedrigeren Ladungszustand Z - 1 und Rekombinationen aus einem höheren Ladungszustand Z + 1 sowie Senken (negative Quellen) durch Ionisation in einen höheren und Rekombination (inkl. Ladungsaustausch) in einen niedrigeren Ladungszustand.

$$S_a^{(p)} = R_{Z-1\to Z}^{(\text{ion})} + R_{Z+1\to Z}^{(\text{rec})} - R_{Z\to Z+1}^{(\text{ion})} - R_{Z\to Z-1}^{(\text{rec})}$$
(3.63)

### 3.2.3 Rückwirkung auf das Hauptplasma

Die Rückwirkung von Verunreinigungen auf das Hauptplasma wird im EMC3-Code allein durch eine Senke  $S_e^{(\text{cool})}$  in der Energiebilanz der Elektronen verursacht. Diese Kühlungsrate beinhaltet Energieverluste durch Strahlung sowie durch Stoßionisation. Für eine Verunreinigungssorte mit Kernladungszahl  $Z_{\text{max}}$  ist  $S_e^{(\text{cool})}$  gegeben durch

$$S_e^{(\text{cool})} = \sum_{n=0}^{Z_{\text{max}}} P_{\text{rad},n} + \sum_{n=0}^{Z_{\text{max}}-1} E_n R_{n \to n+1}^{(\text{ion})}.$$
 (3.64)

 $P_{\text{rad},n}$  sind die Strahlungsverluste<sup>9</sup> von Ionen der Ladung n und  $E_n$  ist die Ionisationsenergie für den Ladungsübergang  $n \to n+1$ . Bei mehreren Verunreinigungssorten wird in Gl. (3.64) zusätzlich über alle Sorten summiert.

 $<sup>{}^{9}</sup>P_{\mathrm{rad},n}$  enthält normalerweise auch die bei der Strahlungsrekombination abgestrahlte Bindungsenergie  $E_n$ , weshalb in  $S_e^{(\mathrm{cool})}$  der Kühlungsbeitrag aufgrund von Strahlung durch  $P_{\mathrm{rad},n}^* = P_{\mathrm{rad},n} - E_n R^{(n \to n-1)}$  ersetzt werden müsste. Dieser Beitrag ist in den Strahlungsraten der beiden in Kapitel 2.2 besprochenen Modelle jedoch nicht enthalten, so dass diese Ersetzung in Gl. (3.64) nicht vorgenommen werden muss. Allerdings fehlt dort der Beitrag durch die kinetische Energie des eingefangenen Elektrons, der ebenfalls abgestrahlt wird.

# Kapitel 4

# Plasmarandschicht-Modellierung mit EMC3-EIRENE

Dieses Kapitel beschreibt die Durchführung von Simulationen der Plasmarandschicht des Fusionsexperiments TEXTOR-DED mit dem EMC3-EIRENE Codepaket. Dazu wird zuerst einmal der Aufbau von TEXTOR-DED kurz erklärt, bevor in den darauf folgenden Abschnitten der Aufbau des EMC3-EIRENE Codepaketes, sowie die Vorbereitungen und der Ablauf einer Simulation beschrieben werden.

## 4.1 Aufbau von TEXTOR-DED

TEXTOR ist ein Tokamak mit einem kreisförmigen Querschnitt der Vakuumkammer. Der große Plasmaradius (Abstand des Zentrums der Vakuumkammer zur Torusachse) beträgt  $R_{\text{maj}} = 175 \text{ cm}$  und der mittlere kleine Plasmaradius  $r_{\text{min}} \approx 48 \text{ cm}$  (s. Abb. 4.1). Zusätzlich wurde ein Dynamisch Ergodischer Divertor (kurz DED) installiert. Ein Ziel des DED ist es, den radialen Transport in der Plasmarandschicht zu erhöhen, um unter anderem das Kernplasma vor Verunreinigungen abzuschirmen [15]. Dies ist ein Aspekt, der im nächsten Kapitel in numerischen Simulationen untersucht wird (s. Kapitel 5.3).

Der DED besteht aus einem Satz von Spulen, mit denen das Magnetfeld in der Randschicht resonant gestört wird. Die Störspulen verlaufen auf der Innenseite (Hochfeld-Seite) parallel zu den Magnetfeldlinien in der q = 3

# KAPITEL 4. PLASMARANDSCHICHT-MODELLIERUNG MIT EMC3-EIRENE

Fläche<sup>1</sup> und sind in 4 Gruppen mit je 4 Spulen angeordnet (s. Abb. 4.1 links). Das Störfeld bewirkt, das Magnetfeldlinien aus ihren Flussflächen abgelenkt werden und sich mit Feldlinien aus anderen Flussflächen vermischen. Dies führt bei ausreichend starker Störung zu einer Ergodisierung des Magnetfeldes im Bereich der resonant gestörten Feldlinien, welche in TEXTOR (im Falle der q = 3 Fläche) in der Randschicht liegen. Eine genauere Beschreibung, sowie Darstellungen der Magnetfeldstruktur sind z.B. in [18, 7] zu finden.



Abbildung 4.1: Blick in den Innenraum von TEXTOR mit den DED-Störspulen auf der Innenseite (links). Im Betriebszustand sind diese durch Graphit-Kacheln geschützt (rechts).

Je nach Flussrichtung des Stroms<sup>2</sup> in den DED-Spulen, kann ein Störfeld mit toroidaler Modenzahl n = 1, 2 oder 4 erzeugt werden. Aufgrund der Ausrichtung zur q = 3-Fläche beträgt die zugehörige poloidale Modenzahl m = 3, 6 oder 12, woraus sich die Bezeichnung m/n-Mode für die komplette Konfiguration ergibt (s. Tab. 4.1).

Mode	Flussrichtung des Stroms	
3/1	+++++++++++++++++++++++++++++++++++	
6/2	+ + + + + +	+ +
12/4	- + + + + + + -	- + + -

Tabelle 4.1: Flussrichtung des Stroms in den DED-Spulen in der m/n = 3/1, 6/2 und 12/4 -Mode [14].

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Das q-Profil gibt das Verhältnis zwischen toroidaler und poloidaler Umlaufzahl einer Magnetfeldlinie in einer magnetischen Flussfläche an, d.h. auf der q = 3 Fläche laufen die Feldlinien dreimal in toroidaler Richtung um, bevor ein poloidaler Umlauf beendet wird.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Es ist DC- oder AC-Betrieb mit einer Frequenz von 50 Hz oder 1 – 10 kHz möglich, mit einem maximalen Störstrom von  $I_{\rm max} = 15$  kA. In der vorliegenden Arbeit wird nur der DC-Betrieb untersucht.

Darüber hinaus verfügt TEXTOR über einen toroidal-symmetrisch angeordneten Pumplimiter, den ALT-II, dessen radiale Position variiert werden kann. Zur Untersuchung der Effekte durch den DED wird dieser deshalb ganz nach außen gefahren.

## 4.2 Das EMC3-EIRENE Codepaket

Das EMC3-EIRENE Codepaket besteht aus zwei separaten Codes, die miteinander gekoppelt wurden. Der EMC3-Code ist ein 3D Monte-Carlo Code zur Berechnung von Plasmaparametern in der Randschicht von Fusionsexperimenten [11]. Dieser berechnet Dichte-  $(n_i, n_a)$ , Geschwindigkeits-  $(u_{i\parallel})$ und Temperaturverteilungen  $(T_i, T_e)$  für (H<sup>+</sup>- und Verunreinigungs-) Ionen im Flüssigkeitsbild (s. Kapitel 3.2 auf Seite 23). Neutraler Wasserstoff wird hingegen von dem kinetischen Transportcode EIRENE [35] behandelt.

Die Inputparameter des EMC3-Codes sind in Folgender Tabelle aufgelistet:

$D_{\perp}^{({\rm H}+)},  D_{\perp}^{({\rm C}+)}$	senkrechter anomaler Teilchentransport
$\chi_{i\perp}, \chi_{e\perp}$	senkrechter anomaler Wärmetransport
$n_{ m in}$	Dichte auf der inneren Simulationsbegrenzung
$\lambda_p,  \lambda_m,  \lambda_e$	Abfalllängen für Teilchen, Impuls und Energie
$\Gamma_{\rm in}^{(e)} \equiv \mathbf{P}_{\rm heat}$	Energiefluss ins Simulationsgebiet (Heizleistung)
$C_{\mathrm{sput}}$	Skalierungsfaktor für die Verunreinigungsquelle

Tabelle 4.2: Inputparameter für den EMC3-Code.

Zur Berechnung der lokalen Plasmaparameter ist der EMC3-Code in mehrere Subroutinen aufgeteilt:

Plasmaparameter	Subroutine im EMC3-Code
$T_e, T_i$	ENERGY
$n_i, u_i$	STREAMING
$n_{ m H}, n_{ m H_2}$	NEUTRAL
$n_a$	IMPURITY

In jeder dieser Subroutinen werden anhand von Quellverteilungen Monte-Carlo Teilchen für die jeweilige Verteilungsfunktion generiert und in einem Gitter verfolgt. Die Plasmaparameter in einer Gitterzelle werden dann anhand der lokalen Aufenthaltsdauer berechnet, wie in [18, Kap. 2.3] beschrieben ist. Um den stark unterschiedlichen parallelen und senkrechten Transport numerisch voneinander zu entkoppeln, wird ein spezielles Gitter mit lokalem Koordinatensystem verwendet, in dem eine Richtung immer parallel zum Magnetfeld verläuft. Bevor mit EMC3-EIRENE Simulationen für die Randschicht von TEXTOR-DED durchgeführt werden können, muss zunächst solch ein Magnetfeldgitter generiert werden (s. Abschnitt 4.3).

Über die NEUTRAL-Subroutine sind EMC3 und EIRENE miteinander gekoppelt. EIRENE verfolgt Neutralteilchen in einem Hintergrundplasma welches vom EMC3 berechnet wird, bis diese durch Stöße mit anderen Teilchen<sup>3</sup> ionisiert werden. Dadurch werden von EIRENE neben Dichten für atomaren und molekularen Wasserstoff  $n_{\rm H}, n_{\rm H_2}$  auch Quellterme für die Bilanzgleichungen der Wasserstoffionen und Elektronen berechnet (s. Kapitel 3.2.1 auf Seite 24). Diese werden in der STREAMING bzw. ENERGY Subroutine als Input verwendet.

### 4.2.1 Quellterme in Bilanzgleichungen

In der ENERGY-Subroutine werden die Temperaturverteilungen für Ionen  $T_i$  und Elektronen  $T_e$  berechnet. Die Elektronen erfahren aufgrund von Stößen mit Verunreinigungsionen eine Kühlung  $S_e^{(\text{cool})}(T_e)$  (s. Kapitel 3.2.2 auf Seite 29), die von der Elektronentemperatur abhängt.  $S_e^{(\text{cool})}$  geht daher als Senke (negative Quelle) in der Energiebilanz der Elektronen ein.

Die Temperaturabhängigkeit einer Quelle S kann, zumindest vereinfacht, durch eine Linearisierung von S [34] berücksichtigt werden:

$$S = S_0 + S_1 T_e (4.1)$$

Es gibt verschiedene Möglichkeiten für die Wahl der Koeffizienten  $S_0$  und  $S_1$ . Da aber Quelle und die Temperatur aus dem vorigen Iterationsschritt bekannt sind, bietet sich folgende Wahl an [34]:

$$S = S^* + \left(\frac{\partial S}{\partial T_e}\right)^* (T_e - T_e^*)$$
(4.2)

$$= \underbrace{S^* - \left(\frac{\partial S}{\partial T_e}\right)^* T_e^*}_{\equiv S_0} + \underbrace{\left(\frac{\partial S}{\partial T_e}\right)^*}_{\equiv S_1} T_e, \qquad (4.3)$$

was einer Taylorentwicklung um  $T_e^*$  bis zum linearen Term entspricht. Mit \* wird dabei immer der Wert aus dem vorigen Iterationsschritt bezeichnet.  $S_e^{(\text{cool})}$  aus Gl. (3.64) enthält nach Gl. (2.10) und Gl. (2.12) neben der

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>An dieser Stelle müsste korrekterweise auch Ladungsaustausch zwischen Neutralteilchen und Verunreinigungsionen berücksichtigt werden. Für neutralen Wasserstoff bedeutet dies aber nur einen geringfügigen Zusatzterm der vernachlässigbar ist (s. Kapitel 5.4 auf Seite 92).

Elektronen- und Verunreinigungsdichte einen Ratenkoeffizienten  $\mathcal{R}$ , der in Gl. (2.14) über eine (bzgl. der logarithmischen Werte) bilineare Interpolation berechnet wurden (s. Kapitel 2.3.1 auf Seite 9):

$$\log \mathcal{R}(T_e, n_e) = \underbrace{(c_1 + c_3 \log n_e)}_{a} + \underbrace{(c_2 + c_4 \log n_e)}_{b} \log T_e.$$
(4.4)

Zur Berechnung von  $\left(\frac{\partial S}{\partial T_e}\right)^*$  müssen die Ableitungen  $\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T_e}$  bestimmt werden:

$$\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial T_e} = \frac{R}{T_e} \frac{\partial \log R}{\partial \log T_e} = \frac{R}{T_e} b.$$
(4.5)

Damit ist nun auch  $\left(\frac{\partial S}{\partial T_e}\right)^*$  direkt berechenbar, so dass  $S_0$  und  $S_1$  festgelegt sind. Aus numerischen Gründen muss der Koeffizient  $S_1$  immer negativ sein, da es ansonsten zu Instabilitäten und unphysikalischen Ergebnissen kommen kann [34]. Aus diesem Grund wird für  $S_0$  und  $S_1$  stattdessen

$$S_1 = \min\left[\left(\frac{\partial S}{\partial T_e}\right)^*, 0\right] \tag{4.6}$$

$$S_0 = S^* - S_1 T_e^* \tag{4.7}$$

verwendet.  $S_0$  beschreibt eine Quelle und  $S_1 T_e$  eine Senke für  $T_e$ -Monte-Carlo Teilchen während der Verfolgung durch das Gitter. Auf diesem Weg findet im EMC3-Code auch die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit von  $S_e^{(\text{cool})}$  statt.

#### 4.2.2 Transport von Verunreinigungen

Verunreinigungen werden im EMC3-Code ausgehend von der IMPURITY-Subroutine behandelt. Anhand der Quelle  $\Gamma_{\rm imp}$  für neutrale Verunreinigungen (s. Kapitel 5.1.1 auf Seite 50) werden Monte-Carlo Teilchen mit der thermischen Geschwindigkeit

$$v_{\rm th} = \sqrt{\frac{T_{\rm surf}}{m}}$$

generiert, wobei deren Richtung zur Flächennormalen der Wand durch eine Kosinus-Verteilung gegeben ist.  $T_{\rm surf}$  gibt die konstant vorgegebene Oberflächentemperatur der Wand an und m die Masse der Verunreinigungsteilchen.

# KAPITEL 4. PLASMARANDSCHICHT-MODELLIERUNG MIT EMC3-EIRENE

Der Ort der ersten Ionisation wird über eine Exponentialverteilung für die Ionisationslänge bestimmt. Dazu wird eine Zufallszahl  $p_{\text{ionization}}$  nach einer Exponentialverteilung generiert und nach jedem Zeitschritt  $\tau$  die mittlere Anzahl an Ionisationsprozessen  $p_{\tau}$  berechnet:

$$p_{\tau} = n_e \mathcal{R}_0^{(\text{ion})} \tau$$

und für die gesamte bislang zurückgelegte Weglänge aufaddiert:

$$p_{\text{travel}} = \sum p_{\tau}$$

Der Zeitschritt $\tau$ muss dabei so gewählt werden, dass maximal ein Stoß vorkommt. Die mittlere Ionisationszeit läßt sich aus Abb. 2.1 oben links abschätzen: Mit

$$\mathcal{R}_0^{(\text{ion})} < 10^{-7} \,\text{cm}^3 \,\text{s}^{-1}, \qquad n_e \lesssim 10^{13} \,\text{cm}^{-3}$$

folgt daraus

$$t_{\rm ion} = \frac{1}{n_e \mathcal{R}_0^{(\rm ion)}} > 10^{-6} \,\mathrm{s.}$$
 (4.8)

als Obergrenze für den Zeitschritt $\tau,$ der in dieser Arbeit zu $\tau=5\cdot 10^{-8}\,{\rm s}$ gewählt wurde.

Sobald  $p_{\text{travel}} = p_{\text{ionization}}$  wird das neutrale Verunreinigungsteilchen ionisiert und der Ort als Ausgangsbasis für den Transport von Verunreinigungsionen verwendet. Monte-Carlo Teilchen für Verunreinigungsionen tragen neben der Dichte  $n_a$  auch die Ladung  $Z_a$ . Übergänge zwischen Ladungszuständen werden durch sogenannte Verlustereignisse berücksichtigt, deren Rate durch

$$r_{\rm loss} = n_e \left( \mathcal{R}_{Z_a}^{\rm (ion)} + \mathcal{R}_{Z_a}^{\rm (rec)} \right)$$

bestimmt ist. Die Wahl des Modells für  $\mathcal{R}_{Z_a}^{(\text{ion})}$  und  $\mathcal{R}_{Z_a}^{(\text{rec})}$  (s. Kapitel 2) kann in der in dieser Arbeit vorgestellten Erweiterung des EMC3-Codes über einen weiteren Inputparameter gesteuert werden.

Nach jedem Zeitschritt wird wieder anhand einer Exponentialverteilung geprüft, ob ein Verlustereigniss eingetreten ist. Falls dies der Fall ist, wird über

$$p_{\rm ion} = \frac{\mathcal{R}_{Z_a}^{\rm (ion)}}{\mathcal{R}_{Z_a}^{\rm (ion)} + \mathcal{R}_{Z_a}^{\rm (rec)}}$$

geprüft, ob es sich dabei um Ionisation oder Rekombination handelt. Da für die niedrigen Ladungszustände bei den zu erwartenden Temperaturen und Dichten eine Rekombination bedeutend unwahrscheinlicher ist als eine Ionisation, wird die Rekombination von C<sup>1+</sup> nach C im EMC3-Code komplett vernachlässigt<sup>4</sup>. Einmal ionisierte Teilchen bleiben demnach ionisiert bis sie auf eine Wand treffen und dort absorbiert werden. Der Verunreinigungsfluss auf die Wand  $\Gamma_{\rm rec}^{(\rm imp)}$  wird aufgrund der geringen Dichten gegenüber dem der Wasserstoffionen  $\Gamma_{\rm rec}^{(\rm H^+)}$  vernachlässigt und trägt daher nicht zum totalen Teilchenfluss auf die Wand bei. Dies vernachlässigt allerdings den Effekt des Selbst-Sputterns, der aufgrund der gleichen Masse der Stoßpartner wesentlich zur Sputter-Ausbeute (sputtering yield) beitragen kann [39]. Ob dieser Effekt in den hier untersuchten Fällen von Bedeutung ist (was wahrscheinlich ist), muss in einer zukünftigen Arbeit untersucht werden.

## 4.3 Magnetfeldgitter

Das schon weiter oben angesprochene Magnetfeldgitter hat im EMC3-Code zusätzlich zu der Funktion Gitterzellen zu definieren, in denen Teilchen gezählt werden, auch den Zweck, den stark unterschiedlichen parallelen und senkrechten Transport numerisch voneinander zu entkoppeln. Dazu wird ein Gitter erzeugt, in dem je vier Magnetfeldlinien die Seitenkanten einer Gitterzelle bilden. Durch die Schnittpunkte dieser vier Magnetfeldlinien mit einer poloidalen Ebene bei  $\varphi_k$  bzw.  $\varphi_{k+1}$  sind die beiden Endflächen der Gitterzelle festgelegt (s. Abb. 4.2).

Im EMC3-Code werden Magnetfeldlinien, die durch diese Gitterzelle laufen, bilinear in den lokalen *Flussröhren-Koordinaten r, s* interpoliert. Sind  $(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_3, \underline{x}_4)$  die Eckpunkte eines Querschnitts der Gitterzelle (s. Abb. 4.2), so lautet die reale Position einer Feldlinie mit Flussröhren-Koordinaten r, s:

$$\underline{x}(r,s) = \underline{x}_A + r \, \underline{x}_B + s \, \underline{x}_C + r \, s \, \underline{x}_D \tag{4.9}$$

Die Koeffizienten  $\underline{x}_A, \underline{x}_B, \underline{x}_C, \underline{x}_D$  sind allein durch die Gitterpunkte  $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_3, \underline{x}_4$  festgelegt (s. auch Anhang C).

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Dies gilt nicht in kalten Divertoren! Für typische TEXTOR-Bedingungen liegt das Verhältnis zwischen Rekombination von  $C^{1+}$  und Ionisation von C aber in der Größenordnung  $10^{-5}$ , wie anhand der in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen berechnet wurde.

# KAPITEL 4. PLASMARANDSCHICHT-MODELLIERUNG MIT EMC3-EIRENE



Abbildung 4.2: Konstruktion einer Gitterzelle durch die Schnittpunkte von vier Magnetfeldlinien mit zwei poloidalen Ebenen  $\varphi_k$  und  $\varphi_{k+1}$ .

Um die bei stark ergodisierten Magnetfeldern auftretenden Gitterdeformationen zu vermeiden, wird das Simulationsgebiet in toroidale Zonen aufgeteilt. An den Zonengrenzen werden die Flussröhren-Koordinaten der Magnetfeldlinien  $r^{(m)}$ ,  $s^{(m)}$  aus einer Zone m über ein reversibles (d.h. exakt invertierbares) Verfahren in die nächste Zone m + 1 abgebildet (reversible field-line mapping, RFLM) [9] (s. auch Abb. 4.3). Die reale Position bleibt dabei erhalten:

$$\underline{x}^{(m)}\left(r^{(m)}, s^{(m)}\right) = \underline{x}_{\text{real}} = \underline{x}^{(m+1)}\left(r^{(m+1)}, s^{(m+1)}\right), \qquad (4.10)$$

wobei  $\underline{x}^{(m)}$  die bilineare Interpolation bzgl. der Flussröhren-Koordinaten  $r^{(m)}, s^{(m)}$  aus Gl. (4.9) darstellt.

Für TEXTOR-DED werden Zonen verwendet, die einen toroidalen Winkel von  $\Delta \varphi = 45^{\circ}$  abdecken [28], d.h. zur Modellierung der 12/4-Mode sind aufgrund der vierfach Symmetrie der Konfiguration 2 Zonen notwendig ( $\Delta \varphi = 90^{\circ}$ ).

Die Generierung des Magnetfeldgitters erfolgt mit dem GOURDON-Code [31], welcher Magnetfeldlinien in toroidalen Konfigurationen verfolgt.



Abbildung 4.3: Grenzfläche zwischen zwei Zonen, an der über ein Mapping-Verfahren die Flussröhren-Koordinaten aus einer Zone in die andere abgebildet werden. Eingezeichnet sind die Endflächen einer Gitterzelle aus Zone m und m + 1.

### 4.3.1 Magnetfeldmodellierung im GOURDON-Code

Das Magnetfeld in TEXTOR-DED setzt sich aus 3 Komponenten zusammen:

$$\underline{B} = \underline{B}_{tor} + \underline{B}_{pol} + \underline{B}_{DED}$$
(4.11)  

$$\underline{B}_{tor}: \text{ toroidales Magnetfeld}$$

$$\underline{B}_{pol}: \text{ poloidales Magnetfeld}$$

 $\underline{\underline{B}}_{pol}$ : poloidales Magnetfeld  $\underline{\underline{B}}_{DED}$ : DED-Störfeld

wobe<br/>i $\underline{B}_{\rm tor}+\underline{B}_{\rm pol}$ ein helikales Magnetfeld bilden, welches den magnetischen Einschluss von geladenen Teilchen bewirkt.

 $\underline{B}_{tor}$  wird in TEXTOR wird durch Spulen erzeugt, die entlang des Torus positioniert sind. Zur Modellierung von  $\underline{B}_{tor}$  im GOURDON-Code wird ein Strom  $I_z$  in z-Richtung (parallel zur Torusachse) verwendet, welcher ein toroidal-symmetrisches Magnetfeld

$$B_{\rm tor}(R) = \frac{I_z}{2\pi R} \tag{4.12}$$

erzeugt.  $I_z$  wird durch die Vorgabe  $B_{tor}^{(0)} = B_{tor}(R_0)$  an einer bestimmen Position  $R_0$  bestimmt. Dabei muss beachtet werden, dass mit dieser Methode keine diamagnetischen Abschirmeffekte oder paramagnetischen Effekte durch das Plasma berücksichtigt werden. Da aber in der Plasmarandschicht fast keine Ströme fließen, kann diese Methode hier dennoch angewendet werden.

 $\underline{B}_{\rm pol}$  wird durch den Plasmastrom selbst erzeugt und kann aus dem poloidalen magnetischen Fluss  $\Psi_{\rm pol}$  abgeleitet werden [18, Kap. 3.2], [17]. Dieser wird von dem MHD-Gleichgewichts Programm DIVA [17] unter der Vorgabe einiger Input-Parameter für ein ungestörtes Gleichgewicht (d.h. ohne DED-Störfeld) berechnet. In einer aktuellen Diplomarbeit [41] wird der EFIT-Code [29, 43] auf TEXTOR angepasst, mit dem Gleichgewichte anhand experimenteller Daten rekonstruiert werden. In Zukunft könnten dadurch die Gleichgewichtsrechnungen mit DIVA durch "reale", vom Experiment rekonstruierte, Daten ersetzt werden.



Abbildung 4.4: Polygonzüge für die DED-Störspulen. Die Stromrichtungen + (grün) und - (blau) sind für die 12/4-Mode eingezeichnet (s. auch Tab. 4.1).

Das DED-Störfeld  $\underline{B}_{\text{DED}}$  wird im GOURDON-Code mittels stromdurchflossener Polygonzüge nach Biot-Savart berechnet. Durch die Verwendung von Polygonzügen geht in  $\underline{B}_{\text{DED}}$  die reale Spulenkonfiguration inklusive Anschlüsse ein. Für jeden Polygonzug kann dabei die Stromstärke  $I_{\text{DED}}$  und Richtung +,- angegeben werden, so dass verschiedene Symmetrien des Magnetfeldes erzeugt werden können (s. Tab. 4.1 und Abb. 4.4). Das so berechnete  $\underline{B}_{\text{DED}}$  gibt genauso wie  $\underline{B}_{\text{tor}}$  nur das Vakuumfeld an. Abschirmeffekte durch das Plasma und Rückwirkungen auf das MHD-Gleichgewicht werden vernachlässigt. Gerade in der 3/1-Mode, in der die Störung bis ins Kernplasma reicht, kann dies zu signifikanten Abweichungen des modellierten Magnetfeldes vom Realen führen. In der 12/4- und 6/2-Mode bleibt das Störfeld aber auf die Randschicht begrenzt, wo die Plasmadichte relativ gering ist und fast keine Ströme fließen. Für diese Konfigurationen ist daher nur eine geringe Abweichung zu erwarten.

Die Überlagerung aller drei Komponenten nach Gl. (4.11) ergibt das Magnetfeld in der Randschicht von TEXTOR-DED.

### 4.3.2 Gittergenerierung

Die Seitenkanten der Gitterzellen sind, wie schon beschrieben, durch Magnetfeldlinien gegeben (s. Abb. 4.2). Um aus den Magnetfeldlinien ein 3D-Magnetfeldgitter zu generieren, wird zunächst ein 2D-Basisgitter in einer poloidalen Ebene  $\varphi_0^{(m)}$  in der Mitte der Zone *m* erstellt. Die Basisgitter für die 12/4-Mode liegen bei  $\varphi_0^{(0)} = 0^{\circ}$  und  $\varphi_0^{(1)} = 45^{\circ}$ .

### Generierung des Basisgitters

Für das Basisgitter wird zunächst eine innere und eine äußere radiale Begrenzung festgelegt. Als Begrenzung werden geschlossene Flussflächen verwendet, wobei für die äußere Begrenzung in jedem Fall eine ungestörte Flussfläche verwendet wird (mit Störfeld gibt es dort nämlich keine geschlossenen Flussflächen mehr). Auf diesen Begrenzungen werden dem EMC3-Code später Randbedingungen für Teilchen-, Impuls- und Energieflüsse vorgeben: auf der Innenseite totale Flüsse durch die Begrenzung  $\Gamma_{in}^{(p)}$ ,  $\Gamma_{in}^{(m)}$  und  $\Gamma_{in}^{(e)}$  und auf der Außenseite Abfalllängen  $\lambda_p$ ,  $\lambda_m$  und  $\lambda_e$  (s. Tab. 4.2).

Zur Berechnung einer Flussfläche wird ein Startpunkt ausgewählt, durch den die Flussfläche verlaufen soll. Von diesem Startpunkt aus wird die Magnetfeldlinie mit dem GOURDON-Code während vieler toroidaler Umläufe verfolgt und die Schnittpunkte mit der Basisgitterebene berechnet. Daraus ergibt sich die Kontur der zugehörigen Flussfläche.

Das Basisgitter wird generiert, indem in den zuvor ausgewählten radialen Bereichen<sup>5</sup> entsprechend der gewünschten Auflösung äquidistante Zwischenpunkte in radialer und poloidaler Richtung erzeugt werden. In der vorliegen-

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Mittels zwei weiterer ungestörter Flussflächen, die innerhalb des Simulationsgebietes liegen, wird vor der DED-Oberfläche ein radialer Bereich ausgewählt, in dem eine höhere Auflösung verwendet wird.



Abbildung 4.5: Basisgitter (toroidaler Index 8) bei  $\varphi = 0^{\circ}$ .

den Arbeit wird eine Auflösung von  $N_{\rm rad} = 53$  radialen und  $N_{\rm pol} = 353$  poloidalen Gitterpunkten verwendet. Abb. 4.5 zeigt ein solches Basisgitter.

### Generierung des 3D-Gitters

Ausgehend von den Gitterpunkten eines Basisgitters werden Magnetfeldlinien mit dem GOURDON-Code in beide Richtungen bis zu den Zonengrenzen verfolgt und die Schnittpunkte mit Zwischenebenen an den toroidalen Positionen  $\varphi_k^{(m)}$  für jede Zone m berechnet. In dieser Arbeit wird immer eine Auflösung von  $N_{\text{tor}} = 17$  Gitterebenen (inkl. Basisgitter) pro Zone verwendet. Die Gitterzellen des 3D-Gitters sind jetzt durch die Schnittpunkte der Feldlinien mit den Zwischenebenen festgelegt (s. auch Abb. 4.2). Abb. 4.6 zeigt eine Gitterebene an der Zonengrenze. Gut zu erkennen sind die Deformationen in der Nähe der DED-Spulen durch das erzeugte Störfeld.

Zum Schluss werden noch eine weitere äußere und eine innere radiale Begrenzung hinzugefügt. Diese bestimmen einen Bereich, in dem nur der EIRENE-Code rechnet, d.h. nur Neutralgas behandelt wird. Alle Neutralteilchen, die in dem inneren Bereich ionisiert werden und daher nicht als Neutralteilchen wieder in die Randschicht gelangen, tragen im stationären Zustand zum Ionenfluss  $\Gamma_{in}^{(p)}$  in die Randschicht (das Rechengebiet des EMC3-Codes) bei. Die Randbedingung für den Teilchenfluss der Wasserstoffionen  $\Gamma_{in}^{(p)}$  wird somit von EIRENE berechnet, während für Verunreinigungen ein verschwindender Ladungsfluss angenommen wird. Als letztes werden noch alle Gitterzellen ausgeschnitten, deren Schwerpunkte hinter der DED- oder ALT-II-Oberfläche liegen. Damit enthält das Magnetfeldgitter neben der Informati-



Abbildung 4.6: Gitter an der Zonengrenze (toroidaler Index 16) bei $\varphi=22.5^{\circ}.$ 

on über das Magnetfeld auch die Geometrie von TEXTOR-DED.

## 4.4 Simulationsablauf

Ausgehend von einer Anfangslösung, zum Beispiel einer konstant vorgegebenen Dichte und Temperatur, wird zunächst die Lösung für ein sauberes Plasma (d.h. ohne Verunreinigungen) berechnet [18, Kap. 3.5]. Dann werden abwechselnd in einem iterativen Verfahren die Bilanzgleichungen für Verunreinigungen und für das Hauptplasma gelöst (s. Abb. 4.7) bis die Ergebnisse konvergieren. Für eine bessere Konvergenz wird ein Relaxationsfaktor  $f_{\text{relax}}$ verwendet, mit dem sich die Verteilung  $\mathcal{F}^{(n)}$  im Iterationsschritt n zu

$$\mathcal{F}^{(n)} = f_{\text{relax}} \mathcal{F}^{(n-1)} - (1 - f_{\text{relax}}) \mathcal{F}^{(\text{new})}$$
(4.13)

ergibt, wobei  $\mathcal{F}^{(\text{new})}$  die neu berechnete Verteilung ist. In dieser Arbeit wird für die Parameter des Hauptplasmas  $f_{\text{relax}} = 0.4$  und für Verunreinigungen  $f_{\text{relax}} = 0.5$  eingesetzt. Als Maß der Konvergenz wird die quadratische Abweichung  $\Delta$ , mit

$$\Delta^2 = \frac{\sum_j p_j V_j \left(\frac{\mathcal{F}^{(n-1)} - \mathcal{F}^{(\text{new})}}{\mathcal{F}^{(n)}}\right)^2}{\sum_j p_j V_j}$$
(4.14)

# KAPITEL 4. PLASMARANDSCHICHT-MODELLIERUNG MIT EMC3-EIRENE

verwendet, die kleiner als 1 % sein soll.  $V_j$  ist das Volumen und  $p_j$  der neue (relaxierte) Druck in der *j*-ten Zelle. Dies ist allerdings nur eine notwendige, aber noch keine hinreichende Bedingung für eine Konvergenz. Ein besseres Kriterium wäre z.B. die lokale Bilanz der Flüsse.

Zunächst wird eine Ausgangsverteilung für Verunreinigungen berechnet, indem drei IMPURITY-Iterationen durchgeführt werden. Der Transport von Verunreinigungen hängt über Temperatur- und Dichtegradienten empfindlich von den lokalen Plasmaparametern des Hauptplasmas ab. Daher empfiehlt es sich, die Verunreinigungs-Läufe von den Ergebnissen eines sauberen Plasmas aus zu starten und dann mehrmals eine IMPURITY-Iteration durchzuführen. Nach Berechnung der Ausgangsverteilung für Verunreinigungen werden drei PLASMA-Iterationen durchgeführt, welche sich jeweils aus einer STREAMING-, einer ENERGY- und drei IMPURITY-Iterationen zusammensetzen. Dadurch entsteht eine Ausgangsverteilung für das Plasma. Mit dieser wird ein Iterationszyklus gestartet, der aus einer NEUTRAL-Iteration und drei PLASMA-Iterationen besteht. Dieser Zyklus wird solange wiederholt bis die Ergebnisse konvergiert sind.



Abbildung 4.7: Schematischer Ablauf einer Simulation mit EMC3-EIRENE.

Die Laufzeiten der einzelnen Subroutinen sind in Abb. 4.8 zu sehen, wobei in jeder Subroutine  $10^4$  Teilchen pro Prozessor und insgesamt 32 Prozessoren parallel eingesetzt wurden. Deutlich zu erkennen ist, dass die Laufzeit stark vom Koeffizienten für senkrechten Transport (s. Kapitel 5.2.3 auf Seite 86)



Abbildung 4.8: Laufzeiten der einzelnen Subroutinen von EMC3-EIRENE für verschiedene Transportkoeffizienten  $D_{\perp}$  auf dem Jump-System. Für den MC-Sprungschritt wurde in dieser Arbeit  $\tau = 5 \cdot 10^{-8}$  s gewählt.

abhängt. Dieses Verhalten erklärt sich dadurch, dass bei niedrigem senkrechten Transport der Plasmaeinschluss besser ist, und daher die Test-Teilchen länger brauchen, bis sie auf eine Wand treffen.

Die mittlere Laufzeit für einen kompletten Zyklus (in der 12/4 Mode) beträgt somit ungefähr 3700 s. Bis zur Konvergenz müssen etwa 8 Zyklen durchlaufen werden. In der Praxis ist für eine Simulation mehr Zeit einzuplanen, denn Rechen-Jobs gelangen auf dem Großrechner Jump (JUelich Multi-Processor, IBM Regatta 690+ [25]) zu anderen Programmen in eine Warteschleife, bevor sie je nach angeforderter Laufzeit und Prozessorbedarf gestartet werden. Dies kann bei Jobs mit einer angeforderten Laufzeit von über 4 Stunden durchaus ein bis zwei Tage dauern. Es hat sich daher als praktisch erwiesen, die Iterationszyklen aufzuteilen und nur weniger als 4 Stunden Laufzeit anzufordern, da diese Jobs wesentlich schneller abgearbeitet werden. Bis zur Konvergenz müssen dann insgesamt mehrere aufeinander aufbauende Jobs gestartet werden, aber man hat die Möglichkeit, zwischendurch die Ergebnisse und deren Konvergenzverhalten zu überprüfen.

# Kapitel 5

# Parameterstudien zum Verunreinigungstransport

In diesem Kapitel werden Verunreinigungen in der Plasmarandschicht von TEXTOR-DED untersucht. Verunreinigungen sind hier Kohlenstoffteilchen, die beim Kontakt zwischen Plasma und den Graphit-Kacheln, welche die DED-Störspulen schützen (s. Abb. 4.1), entstehen.

In Abschnitt 5.1 wird die Entstehung und der Transport von Verunreinigungen für feste Inputparameter (s. Tab. 4.2) eines konsistenten Hauptplasmas untersucht. Danach werden in Abschnitt 5.2 die Inputparameter des Hauptplasmas  $n_{\rm in}$ ,  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  und  $D_{\perp}$  variiert und deren Einfluss auf Verunreinigungen untersucht. Es werden Vergleichsrechnungen durchgeführt, die den Unterschied zwischen Korona- und CR-Modell zeigen. Zwei weitere Abschnitte behandeln die Abschirmwirkung des DED (Abschnitt 5.3) und den Effekt von Ladungsaustausch zwischen Verunreinigungsionen und neutralem Wasserstoff (Abschnitt 5.4). Alle weiteren Inputparameter  $\lambda_p = \lambda_m = 2.1 \,\mathrm{cm}$ und  $\lambda_e = 5.0 \,\mathrm{cm}^1$ , sowie  $\chi_{i\perp} = \chi_{e\perp} = 3.2 \cdot 10^4 \,\mathrm{cm}^2 \,\mathrm{s}^{-1}$  und  $C_{\rm sput} = 0.02$ werden in allen Simulationen konstant gehalten. Für den Impulsfluss in das Simulationsgebiet wird  $\Gamma_{\rm in}^{(m)} = 0$  angenommen.

Alle Simulationen basieren zum besseren Vergleich auf demselben MHD-Gleichgewicht, das an experimentelle Daten des TEXTOR-Schusses 95896 angepasst wurde:

$B_{\rm tor}(R=165{\rm cm})$	= 1.994 T
$I_{ m plasma}$	$= 350 \mathrm{kA}$
$q_{ m boundary}$	= 3.715

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Die Werte für  $\lambda_p$  und  $\lambda_e$  sind aus experimentellen Daten abgeschätzt. Deren Einfluss ist bei ausreichender radialer Ausdehnung des Simulationsgebietes aber minimal.

Da insbesondere das q-Profil (Verhältnis zwischen toroidaler und poloidaler Umlaufzahl einer Magnetfeldlinie) einen wesentlichen Einfluss auf Transportprozesse hat, muss auch dieses zusätzlich zu den hier durchgeführten Studien variiert werden. Dieser Vorgang würde jedoch den Rahmen dieser Arbeit sprengen und muss auf zukünftige Studien verschoben werden.

## 5.1 Verunreinigungen in der Plasmarandschicht

In diesem Abschnitt wird die Entstehung und der Transport von Verunreinigungen in einem konsistenten Hintergrund-Plasma mit festen Inputparametern untersucht, um ein Verständnis für den Kreislauf von Verunreinigungen im Plasma zu erlangen.

$D_{\perp}^{(\mathrm{H}+)}$	=	$0.9 \cdot 10^4  \mathrm{cm}^2  \mathrm{s}^{-1}$
$n_{\rm in}$	=	$1.36 \cdot 10^{13}  \mathrm{cm}^{-3}$
$\mathbf{P}_{\mathrm{heat}}$	=	$150\mathrm{kW}$
$I_{\rm DED}$	=	$13.5 \mathrm{kA}  (12/4\text{-Mode})$

## 5.1.1 Verunreinigungsquelle

Die Quelle für Verunreinigungen sind Ionen, die auf die Oberfläche des DED und des ALT-II Limiters auftreffen, dort mit einem Elektron (bzw. mehreren bei Verunreinigungen) rekombinieren und als neutrale Teilchen wieder ins Plasma gelangen (*recyceln* genannt), wobei sie zusätzlich Wandmaterial erodieren. Im EMC3-Code wird als Quelle vereinfacht

$$\Gamma_{\rm imp} = C_{\rm sput} \cdot \Gamma_{\rm rec} \tag{5.1}$$

angenommen, wobei  $C_{\rm sput}$  die konstante Sputter-Ausbeute des Recycling-Flusses  $\Gamma_{\rm rec}$  für H<sup>+</sup>-Ionen ist und der Beitrag durch Verunreinigungsionen aufgrund der geringen Dichten vernachlässigt wird. Dies ist eine kritische Approximation, da zum einen Selbst-Sputtern einen erheblichen Beitrag zu  $C_{\rm sput}$  liefert und zum anderen  $C_{\rm sput}$  sehr gut durch die Bohdansky-Formel (hier z.B. für senkrechten Einfallswinkel)

$$C_{\text{sput}}(E_0) = Q S_n(\varepsilon) g(E_{th}/E_0)$$
(5.2)

beschrieben wird [39, Kap. 3.3] und von der Einschlags-Energie  $E_0$  abhängt. Q ist der yield factor,  $S_n(\varepsilon)$  der nuclear stopping cross-section und g berücksichtigt die Abhängigkeit vom Schwellwert  $E_{th}$ . Für eine genauere Diskussion sei auf [39, Kap. 3.3] oder [6] verwiesen.

Da  $\Gamma_{\rm imp}$  durch  $\Gamma_{\rm rec}$  gegeben ist, ist zunächst die Dichte der H<sup>+</sup>-Ionen und ihr Weg zur Wand interessant. Abb. 5.1 zeigt die H<sup>+</sup>-Dichte  $n_{\rm H^+}$  (oben

links) und den Teilchenfluss auf die DED-Oberfläche  $\Gamma_{\rm DED}^{-2}$  (oben rechts).  $n_{\rm H^+}$  ist als poloidaler Schnitt durch den Torus an der toroidalen Position  $\varphi = 0$  zu sehen. Zur besseren Übersicht der Plasmaparameter in der Randschicht wurden Polarkoordinaten verwendet, d.h. der poloidale Winkel  $\vartheta$  ist gegen den kleinen Radius  $r_{\rm min}$  aufgetragen. Gut zu erkennen ist der DED auf der Hochfeld-Seite (Innenseite) durch die Aussparung in der Simulationsdomäne.  $\Gamma_{\rm DED}$  ist in Abb. 5.1 oben rechts als Aufsicht auf die DED-Oberfläche zu sehen, wobei die seitlichen Flächen oben bzw. unten umgeklappt wurden, damit diese ins Bild passen. Aufgrund der 4-fach Symmetrie in der 12/4-Mode ist nur der toroidale Bereich von  $\varphi = -22.5^{\circ}$  bis  $\varphi = 62.5^{\circ}$  gezeigt.



Abbildung 5.1: Plasmadichte  $n_{\rm H^+}$  (oben links), Teilchenfluß auf die DED-Oberfläche  $\Gamma_{\rm DED}$  (oben rechts) und Verbindungslänge einer Feldlinie  $L_{\rm c}$ (unten links und rechts). Die Maximalwerte auf den Farbskalen betragen  $n_{\rm H^+}^{\rm max} = 1.4 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$  (rot),  $\Gamma_{\rm DED}^{\rm max} = 0.14 \,{\rm A} \,{\rm cm}^{-2}$  (weiß), für  $L_{\rm c}$  im poloidalen Schnitt  $L_{\rm c}^{\rm max} = 4 \cdot 10^4 \,{\rm cm}$  (schwarz) und in der Aufsicht auf die DED-Oberfläche  $L_{\rm c}^{\rm max} = 1.6 \cdot 10^4 \,{\rm cm}$  (weiß).

 $<sup>^2</sup>$ Auch auf die Oberfläche des ALT-II Limiters treffen Teilchen auf. Da sich dieser aber weiter außen befindet, macht dies nur einen geringen Teil (hier etwa 8 %) aus und wird hier nicht weiter diskutiert. In den Berechnungen wird dieser Anteil aber korrekt berücksichtigt.

### Magnetfeldstruktur

Um die Verteilung von  $\Gamma_{\text{DED}}$  und damit von  $\Gamma_{\text{imp}}$  zu verstehen, schauen wir uns erst einmal die Struktur des Magnetfeldes an (Abb. 5.1 unten). Dort ist die Verbindungslänge  $L_c$  einer Magnetfeldlinie zu sehen, welche die Länge der Feldlinie zwischen den Schnittpunkten mit der Wand angibt. Auffällig ist die komplexe Grenzfläche zwischen Feldlinien mit  $L_c \gtrsim 5 \cdot 10^3$  cm (ergodische Feldlinien, mittelblaue bis schwarze Bereiche in Abb. 5.1 unten links) und Feldlinien mit  $L_c \approx 1 - 5 \cdot 10^3$  cm (laminare Feldlinien, hellblaue Bereiche in Abb. 5.1 unten links und dunkelblaue Bereiche in Abb. 5.1 unten rechts). Der Bereich mit den ergodischen Feldlinien wird auch als ergodische Finger bezeichnet. Weiterhin wird der Bereich direkt vor der DED-Oberfläche mit  $L_c < 10^3$  cm als Private-Flusszone (schwarze Bereiche in Abb. 5.1 unten rechts) bezeichnet. Dies sind typische Bezeichnungen, wie sie auch in anderen Arbeiten zu TEXTOR, z.B. in [7, 18, 37], verwendet werden.

Senkrechter Transport führt zur Befüllung der ergodischen Feldlinien und damit zu einer hohen Dichte ( $n_i \approx 8 \cdot 10^{12} \,\mathrm{cm}^{-3}$ , hellgrün in Abb. 5.1 oben links) in diesem Bereich. Der Transport zur Wand  $\Gamma_{\mathrm{DED}} = 593 \,\mathrm{A}$  teilt sich auf ergodische und laminare Feldlinien auf (vgl. Abb. 5.1 links oben und unten), wobei die Verteilung empfindlich von den Inputparametern  $D_{\perp}, \chi_{\perp}$  abhängt.

### Modellierung der Verunreinigungsquelle

Mit  $\Gamma_{\text{rec}} = \Gamma_{\text{DED}} + \Gamma_{\text{Alt-II}}$  ergibt sich  $\Gamma_{\text{imp}}$  im EMC3-Code aus Gl. (5.1). Die mittlere Eindringtiefe  $\lambda_n$  für neutrale Verunreinigungen kann wie folgt abgeschätzt werden (vgl. Kapitel 4.2.2):

$$\lambda_n = \frac{v_{\text{thermisch}}}{n_e \mathcal{R}_0^{(\text{ion})}}, \qquad v_{\text{thermisch}} = \sqrt{\frac{T_{\text{surf}}}{m_c}}.$$
(5.3)

Bei einer Dichte von  $n_e \approx 7.5 \cdot 10^{12} \,\mathrm{cm}^{-3}$  und Temperatur  $T_e \approx 25 \,eV$  kann  $\mathcal{R}_0^{(\mathrm{ion})}$  aus Abb. 2.1 zu  $\mathcal{R}_0^{(\mathrm{ion})} \approx 5 \cdot 10^{-8} \,\mathrm{cm}^3 s^{-1}$  abgeschätzt werden. Mit einer Oberflächentemperatur von z.B.  $T_{\mathrm{surf}} \approx 800 \,\mathrm{K}$  kann daraus  $\lambda_n \approx 2 \,\mathrm{mm}$  abgeschätzt werden. Die Verteilung für  $\Gamma_{\mathrm{imp}}$  liegt also direkt vor der DED-Oberfläche. Dies ist eine weitere kritische Approximation, da die Energie gesputterter Teilchen einer Thompson-Verteilung

$$N(E) \propto \frac{E}{\left(E + E_B\right)^3} \tag{5.4}$$

genügt, und  $E \gg E_{\text{thermisch}}$  gilt. EIRENE hat bereits ein realistisches Sputter-Modell (s. Gl. (5.2) und Gl. (5.4)) implementiert, weshalb in einer neueren Version von EMC3-EIRENE der Sputter-Prozess und auch der Transport von neutralen Verunreinigungen von EIRENE übernommen wird. Anschließend wird  $\Gamma_{\rm imp}$  an den EMC3-Code übergeben, der wie bisher den Transport von Verunreinigungsionen berechnet. Abb. 5.2 zeigt einen Vergleich der von EMC3 (links) und EIRENE (rechts) berechneten Verunreinigungsquellen, wobei die Quellstärken jeweils normiert wurden. Für alle anderen Simulationen in dieser Arbeit wurde aber noch die alte Version verwendet, in der der EMC3-Code  $\Gamma_{\rm imp}$  berechnet.



Abbildung 5.2: Normierte Quellstärke für Verunreinigungen, berechnet von EMC3 (links) und von EIRENE (rechts).

In Abb. 5.2 ist zu sehen, dass  $\lambda_n$  (Eindringtiefe) in der EIRENE-Rechnung viel höher ist als in der EMC3-Rechnung. Aber auch in dieser Rechnung ist  $\lambda_n$  zum Teil höher als über Gl. (5.3) abgeschätzt wurde. Das liegt daran, dass in der Privaten-Flusszone  $n_e$  stark reduziert ist, wodurch auch die Ionisationsrate reduziert und dementsprechend  $\lambda_n$  erhöht ist. Das viel höhere  $\lambda_n$  in der EIRENE-Rechnung läßt sich anhand Gl. (5.4) erklären, nach der  $E \gg E_{\text{thermisch}}$  gilt.

Die totale Quelle  $\Gamma_{\rm imp}$  wird vom EMC3-Code zu  $\Gamma_{\rm imp} = 12.9$  A berechnet, vom EIRENE-Code hingegen nur zu  $\Gamma_{\rm imp} = 1.4$  A. Das sind gerade einmal 11%. EIRENE verwendet zwar die Sputter-Ausbeute aus Gl. (5.2), berücksichtigt allerdings auch nur den H<sup>+</sup>-Fluss. Bei einer Berücksichtigung von Selbst-Sputtern würde  $\Gamma_{\rm imp}$  dann wieder deutlich höher ausfallen. Genau diese Berücksichtigung ist als nächste Erweiterung von EMC3-EIRENE geplant.

### 5.1.2 Verunreinigungsdichten

Im stationären Zustand stellt sich eine Dichteverteilung ein, die durch ein lokales Gleichgewicht zwischen Ionisation, Rekombination und Transport sowohl parallel als auch senkrecht zum Magnetfeld bestimmt ist. Abb. 5.3



## KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.3: Dichten der Kohlenstoffionen C<sup>1+</sup> (oben links) bis C<sup>6+</sup> (unten rechts) im Korona-Modell. Die Maximalwerte (rot) auf den Farbskalen betragen  $n_{\rm max} = 1.1 \cdot 10^{11} \,{\rm cm}^{-3}$ , die Skala für C<sup>6+</sup> wurde um den Faktor 20 angepasst.

zeigt die Simulationsergebnisse für die Kohlenstoffdichten  $n_{C^{1+}}$  bis  $n_{C^{6+}}$ , bei Anwendung des Korona-Modells für atomare Prozesse.

In den Dichteverteilungen für C<sup>1+</sup>- und C<sup>2+</sup>-Ionen  $n_{\rm C^{1+}}$ ,  $n_{\rm C^{2+}}$  (Abb. 5.3 oben) fällt wieder die Zackenstruktur auf, die genau wie die der Verteilung für  $\Gamma_{\rm imp}$  durch die Reduktion von  $n_e$  in der Privaten-Flusszone entsteht. Dieses Verhalten ist nochmal gut in Abb. 5.4 dokumentiert, wo  $n_{\rm C^{1+}}$  bis  $n_{\rm C^{4+}}$  entlang zweier Feldlinien gezeigt sind.



Abbildung 5.4: C<sup>1+</sup>- bis C<sup>4+</sup>-Dichten entlang einer Feldlinie mit  $L_c \approx 1.6 \cdot 10^4 \text{ cm}$  ( $F_1$ , durchgezogene Linie) und  $L_c = 600 \text{ cm}$  ( $F_2$ , unterbrochene Linie) entlang der ersten  $\Delta L = 600 \text{ cm}$ .

Durch die höhere Quelle in Bereichen mit hohem  $L_c$  sind auch dort  $n_{C^{1+}}$ und  $n_{C^{2+}}$  vor der DED-Oberfläche höher als in Bereichen mit niedrigem  $L_c$ . Nach  $\Delta L = 200 \text{ cm}$  entlang den Feldlinien in Abb. 5.4 dreht sich dieses Verhalten aber genau um:

$n  \left[ 10^{11}  \mathrm{cm}^{-3} \right]$	$n_{\rm C^{1+}}^{(L=0{\rm cm})}$	$n_{\rm C^{1+}}^{(L=200{\rm cm})}$	$n_{C^{2+}}^{(L=0cm)}$	$n_{C^{2+}}^{(L=200\mathrm{cm})}$
$F_1: L_c \approx 1.6 \cdot 10^4 \mathrm{cm}$	0.76	0.12	1.35	0.31
$F_2: L_c = 600 \mathrm{cm}$	0.68	0.26	0.91	0.33

Das liegt an dem höheren  $n_e$  und  $T_e$  entlang  $F_1$ , welche in Abb. 5.1 oben links als 2D-Profil  $(n_e)$  bzw. in Abb. 5.5 entlang denselben Feldlinien wie in Abb. 5.4  $(T_e)$  zu sehen sind. Mit höherem  $n_e$  und  $T_e$  auf  $F_1$  sind dort auch die Ionisationsraten höher, so dass sich mit zunehmender Entfernung von der Quelle das Ionisationsgleichgewicht zu C<sup>4+</sup> hin verlagert. Da die Eindringtiefen der Feldlinien (Abb. 5.5, unterbrochene Linie) auf den ersten  $\Delta L = 300 \, cm$  etwa gleich sind, führt das oben beschrieben Verhalten zu der in Abb. 5.3 oben beobachteten Zackenstruktur von  $n_{C^{1+}}$  und  $n_{C^{2+}}$ .

In weiten Teilen des Simulationsgebiets dominieren die  $C^{4+}$ -Ionen, was in Abb. 5.3 Mitte rechts deutlich zu sehen ist. Das liegt an der Helium-artigen Struktur des  $C^{4+}$ -Ions, bei dem die restlichen beiden Elektronen eine komplette Schale füllen und deshalb stark gebunden sind. Für Ionisation oder auch Anregung muss deshalb deutlich mehr Energie aufgebracht werden als



Abbildung 5.5:  $T_e$  entlang der beiden Feldlinien  $F_1$  (durchgezogene Linie) und  $F_2$  (unterbrochene Linie) aus Abb. 5.4 mit zugehöriger radialer Position  $r_{\min}$ .

bei C<sup>1+</sup> bis C<sup>3+</sup>. Deshalb sind auch  $n_{C^{5+}}$  und  $n_{C^{6+}}$  selbst am inneren Rand bei hohen Temperaturen relativ niedrig (ca. 20 % bzw. 0.5 %).

### 5.1.3 Ionisationsgleichgewicht

Auf  $F_1$  in Abb. 5.4 ist zwischen L = 200 cm und L = 600 cm eine Änderung im lokalen Ionisationsgleichgewicht beobachtbar, obwohl  $T_e$  in etwa konstant bleibt (vgl. Abb. 5.5). Auch  $n_e$  bleibt auf dem Stück in etwa konstant, was aber nicht explizit gezeigt ist. Ursache für die Änderung im Ionisationsgleichgewicht ist der nicht zu vernachlässigende Einfluss des Teilchentransportes. Um diesen Einfluss genauer zu untersuchen, wird für die beiden Feldlinien aus Abb. 5.4 die Verteilung der Ladungszustände bei denselben lokalen Werten für  $n_e$  und  $T_e$  berechnet, die sich ohne Transport ergeben würde. Die Bilanzgleichung ohne Transport für eine Ionensorte der Ladung Z lautet (vgl. Gl. (3.63) und Gl. (2.1))

$$0 = \mathcal{R}_{Z+1}^{(\text{rec})} n_{Z+1} + \mathcal{R}_{Z-1}^{(\text{ion})} n_{Z-1} - \left( \mathcal{R}_{Z}^{(\text{rec})} + \mathcal{R}_{Z}^{(\text{ion})} \right) n_{Z}.$$
(5.5)

 $n_e$ wurde hier bereits aus allen Termen heraus gekürzt. Die Bilanzgleichung für den Ladungszustand Zkann nun leicht zu

$$0 = \mathcal{R}_{Z+1}^{(\text{rec})} n_{Z+1} - \mathcal{R}_{Z}^{(\text{ion})} n_{Z}$$
 (5.6)

umgeformt werden. Für Z = 0 folgt Gl. (5.6) sofort aus Gl. (5.5), denn Ionisation aus und Rekombination in einen niedrigeren Ladungszustand gibt es nicht. Für Z > 1 läßt sich Gl. (5.6) per Induktion beweisen, wenn Gl. (5.6) für Z - 1 zu Gl. (5.5) addiert wird. Da für  $Z = Z_{\text{max}}$  die rechte Seite von Gl. (5.6) identisch verschwindet ist, bleiben  $Z_{\text{max}} - 1$  Gleichungen für  $Z_{\text{max}}$ Unbekannte; es können also nur die Konzentrationen und nicht die absoluten Dichten berechnet werden. Mit der Abkürzung  $c_Z^* \equiv \frac{n_Z}{n_0}$  folgt automatisch  $c_0^* = 1$  und Gl. (5.6) kann zu

$$c_{Z+1}^{*} = \frac{\mathcal{R}_{Z}^{(\text{ion})}}{\mathcal{R}_{Z+1}^{(\text{rec})}} c_{Z}^{*}$$
(5.7)

umgeformt werden, womit alle  $c_Z^*$  für  $1 < Z \leq Z_{\max}$  nacheinander berechnet werden können. Mit der Normierung

$$\sum_{Z=0}^{Z_{\text{max}}} c_Z = 1 \tag{5.8}$$

läßt sich daraus nun die Konzentration  $c_Z$  ableiten:

$$c_Z = \frac{c_Z^*}{\sum_{j=0}^{Z_{\text{max}}} c_j^*}.$$
 (5.9)

Abb. 5.6 zeigt die Konzentrationen der Kohlenstoffionen entlang der Feldlinien aus Abb. 5.4, wobei hier die logarithmische Skala beachtet werden muss. Das Ionisationsgleichgewicht ohne Transport ergibt  $c_4 \approx 1$  im gesamten Bereich  $\Delta L = 600 \text{ cm}$ .  $c_1$ ,  $c_2$  sowie  $c_6$  sind vernachlässigbar klein, lediglich  $c_5 > 0.01$  auf  $F_1$  ab L > 100 cm und  $c_3 > 0.01$  direkt an der DED-Oberfläche. Weiter innen auf  $F_1$  (nicht mehr in Abb. 5.6 zu sehen) ergibt sich bei höheren  $n_e$  und  $T_e$ :  $c_4 \approx c_5 \approx 0.5$ . Es ist damit klar zu erkennen, dass der Transport einen signifikanten Einfluss auf das Ionisationsgleichgewicht hat.

### 5.1.4 Verunreinigungs-Kreislauf

Zum Verständnis des Kreislaufs von Verunreinigungsionen im Plasma, variieren wir nun deren senkrechten Transportkoeffizienten  $D_{\perp}^{\rm (C+)}$ . Abb. 5.7 zeigt die Dichtedifferenzen

$$\Delta n_Z = n_Z^{\left(2D_{\perp}^{(C+)}\right)} - n_Z^{\left(D_{\perp}^{(C+)}\right)}$$

bei Verdopplung von  $D_{\perp}^{\rm (C+)}=0.9\cdot10^4\,{\rm cm}^2$  auf  $D_{\perp}^{\rm (C+)}=1.8\cdot10^4\,{\rm cm}^2$ . Um die Wechselwirkung zwischen kurzen und langen Feldlinien zu betonen, ist

# KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT



Abbildung 5.6: Konzentrationen  $c_Z$  in einem Ionisationsgleichgewicht unter Vernachlässigung des Teilchentransports entlang der beiden Feldlinien  $F_1$ (durchgezogene Linie) und  $F_2$  (unterbrochene Linie) aus Abb. 5.4.

zusätzlich die Kontur der ergodischen Finger aus Abb. 5.1 unten links eingezeichnet.

Aufgrund des Dichtegradienten (vgl. Abb. 5.3) bewirkt eine Erhöhung von  $D_{\perp}^{(C+)}$  eine stärkere Diffusion nach innen in die ergodischen Finger auf der Hochfeld-Seite, weshalb  $\Delta n_{C^{1+}} \approx \Delta n_{C^{2+}} \approx -0.7 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  vor der DED-Oberfläche und in der Privaten-Flusszone zu beobachten ist (Abb. 5.7 oben, blaue Bereiche). In den ergodischen Fingern findet aufgrund von höherem  $n_e$  und  $T_e$  weitere Ionisation nach  $C^{3+}$  bzw.  $C^{4+}$  statt, was an deren stark erhöhten Dichten zu sehen ist ( $\Delta n_{C^{3+}} \approx 1.1 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  und  $\Delta n_{C^{4+}} \approx 1.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ , orange bis gelbe Bereiche in Abb. 5.7 Mitte). Die Verringerung von  $\Delta n_{C^{4+}} \approx -0.6 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  in den ergodischen Fingern auf der Niederfeld-Seite ist ebenfalls durch den Dichtegradienten erklärt (vgl. Abb. 5.3 Mitte rechts).

Eine Erhöhung von  $D_{\perp}^{(C+)}$  bewirkt außerdem  $\Delta n_{C^{5+}} \approx -0.3 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  und  $\Delta n_{C^{6+}} \approx -0.01 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  in inneren Bereich des Simulationsgebietes, da diese Ionen durch höheres  $D_{\perp}^{(C+)}$  stärker in kühlere Bereiche diffundieren und dort rekombinieren.



Abbildung 5.7: Dichtedifferenzen  $\Delta n_{\rm C^{1+}}$  (oben links) bis  $\Delta n_{\rm C^{6+}}$  (unten rechts) zwischen einer Simulation mit  $D_{\perp}^{\rm (C+)} = 1.8 \cdot 10^4 \,\mathrm{cm\,s^{-1}}$  und  $D_{\perp}^{\rm (C+)} = 0.9 \cdot 10^4 \,\mathrm{cm\,s^{-1}}$ . Die Farbskala für  $\Delta n_{\rm C^{6+}}$  wurde um den Faktor 10 angepasst.

Abb. 5.8 zeigt den totalen Gehalt  $M_Z$  eines Ladungszustandes Z

100 200 Poloidal angle [deg]

300

$$M_Z = m_c \sum_i V_i n_Z, \qquad (5.10)$$

100

200 Poloidal angle [deg] 300

wobe<br/>i $V_i$ das Volumen der i-ten Gitterzelle ist. Der totale Gehalt <br/>an Verunreinigungsionen  $M_{\rm imp}$ ist dann gegeben durch

$$M_{\rm imp} = \sum_{Z=1}^{Z_{\rm max}} M_Z.$$
 (5.11)

# KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

 $M_{\rm C^{1+}}(-7\,\%)$  und  $M_{\rm C^{2+}}(-4\,\%)$  nehmen insgesamt ab bei Verdopplung von  $D_{\perp}^{\rm (C+)}$ , wie in Abb. 5.8 gezeigt ist, wohingegen  $M_{\rm C^{3+}}(+7\,\%)$  und  $M_{\rm C^{4+}}$  (+14 %) zunehmen und  $M_{\rm C^{5+}}(-23\,\%)$  und  $M_{\rm C^{6+}}(-41\,\%)$  auch abnehmen. Insgesamt steigt  $M_{\rm imp}=0.86\,\mu{\rm g}$  auf  $M_{\rm imp}=0.92\,\mu{\rm g}$  (+7 %). Die Änderungen bei einer Erhöhung von  $D_{\perp}^{\rm (C+)}=0.45\cdot10^4\,{\rm cm^2\,s^{-1}}$  auf  $D_{\perp}^{\rm (C+)}=0.9\cdot10^4\,{\rm cm^2\,s^{-1}}$  fallen ähnlich aus,  $M_{\rm imp}=0.81\,\mu{\rm g}$  nimmt dabei um 5 % zu. Der Einfluss von  $D_{\perp}^{\rm (C+)}$  auf  $M_{\rm imp}$  fällt demnach nicht sehr stark aus.



Abbildung 5.8: Totaler Gehalt  $M_Z$  der Kohlenstoffionen für verschiedene Transportkoeffizienten  $D_{\perp}^{(C+)}$ .

### 5.1.5 Thermokräfte

Durch Thermokräfte werden Verunreinigungen vom kühleren Rand zum wärmeren Kernplasma hingezogen (vgl. Gl. (3.9) und Gl. (3.10)):

$$F_{\rm th} = \alpha_Z \,\nabla_{\parallel} T_e + \beta_Z \,\nabla_{\parallel} T_i. \tag{5.12}$$

Der genaue Effekt von  $F_{\rm th}$  wird untersucht, indem zum Vergleich eine Simulation ohne Thermokräfte durchgeführt wird. In Abb. 5.9 sind die Dichtedifferenzen

$$\Delta n_Z = n_Z^{(\text{th})} - n_Z^{(\text{no th})}$$

gezeigt, die bei Berücksichtigung von  $F_{\rm th}$  fast überall positiv ausfallen (rote bis gelbe Bereiche).



Abbildung 5.9: Dichtedifferenzen  $\Delta n_{\rm C^{1+}}$  (oben links) bis  $\Delta n_{\rm C^{6+}}$  (unten rechts) aufgrund von Thermokräften. Die Farbskala für  $\Delta n_{\rm C^{6+}}$  wurde wieder um den Faktor 10 angepasst. Rote bis gelbe Bereiche zeigen eine Erhöhung und blaue Bereiche eine Verringerung der Dichte durch Thermokräfte.

Für eine genauere Untersuchung greifen wir wieder eine Feldlinie heraus und schauen uns die Kohlenstoffdichten entlang dieser Feldlinie an (Abb. 5.10). Die Temperatur auf dieser Feldlinie wurde bereits in Abb. 5.5 gezeigt. Ein Blick dorthin macht deutlich, dass der Temperaturgradient entlang der Feldlinie auf den ersten  $\Delta L = 200 \text{ cm}$  am größten ist.

Der größte Effekt durch  $F_{\rm th}$  ist bei  $n_{\rm C^{3+}}$  und  $n_{\rm C^{4+}}$  im Bereich vor der DED-Oberfläche zu sehen (gelbe Bereiche in Abb. 5.9 Mitte), wo auch



Abbildung 5.10: Kohlenstoffdichten entlang einer Feldlinie (durchgezogene Linie) und Dichten, die sich ohne Thermokräfte ergeben (unterbrochene Linie).

 $\nabla_{\parallel} T_e$  und  $\nabla_{\parallel} T_i$  am größten sind:  $\Delta n_{\mathrm{C}^{3+}} = 2.4 \cdot 10^{10} \,\mathrm{cm}^{-3}$  (+99%) und  $\Delta n_{\mathrm{C}^{4+}} = 3.1 \cdot 10^{10} \,\mathrm{cm}^{-3}$  (+221%).  $\Delta n_{\mathrm{C}^{1+}}$  ändert sich dagegen nicht signifikant, wie Abb. 5.10 und Abb. 5.9 oben links verdeutlichen. Dieses Verhalten erklärt sich dadurch, dass die Koeffizienten  $\alpha_Z, \beta_Z$  von  $Z^2$  abhängen, weshalb  $F_{\mathrm{th}}$  für C<sup>1+</sup> am geringsten ist.

Bei  $n_{\rm C^{2+}}$  fällt auf, dass diese durch  $F_{\rm th}$  direkt vor der DED-Oberfläche kleiner  $(\Delta n_{\rm C^{2+}} = -3 \cdot 10^{10} \,{\rm cm^{-3}})$  und erst nach  $\Delta L = 35 \,{\rm cm}$  größer  $(\Delta n_{\rm C^{2+}} = 1.1 \cdot 10^{10} \,{\rm cm^{-3}})$  wird. Das ist in der Umverteilung entlang der Feldlinie durch  $F_{\rm th}$  von kälteren in wärmere Gebiete begründet und tendenziell auch für  $n_{\rm C^{3+}}$  und  $n_{\rm C^{4+}}$  zu sehen. Wegen der viel geringeren absoluten Dichten  $n_{\rm C^{5+}}$ ,  $n_{\rm C^{6+}}$  sind deren Änderungen in Abb. 5.10 kaum erkennbar. Abb. 5.9 unten und Abb. 5.11 zeigen jedoch, dass sie dennoch vorhanden sind.

In Abb. 5.11 ist der totale Gehalt  $M_Z$  zu sehen, der für alle Ladungszustände bei Berücksichtigung von  $F_{\rm th}$  im Einklang mit Abb. 5.9 höher ausfällt:  $M_{\rm C^{1+}}$ (+2%),  $M_{\rm C^{2+}}$  (+13%),  $M_{\rm C^{3+}}$  (+34%),  $M_{\rm C^{4+}}$  (+39%),  $M_{\rm C^{5+}}$  (+46%) und  $M_{\rm C^{6+}}$  (+19%). Insgesamt erhöht sich  $M_{\rm imp}$  durch  $F_{\rm th}$  von  $M_{\rm imp} = 0.65 \,\mu {\rm g}$ auf  $M_{\rm imp} = 0.86 \,\mu {\rm g}$  (+32%). Abschließend kann gesagt werden, dass Thermokräfte einen signifikanten Einfluss auf das Transportgleichgewicht und damit auf die lokale Zusammensetzung des Plasmas haben.  $F_{\rm th}$  darf daher in Rechnungen nicht vernachlässigt werden.



Abbildung 5.11: Totaler Gehalt  $M_Z$  der Kohlenstoffionen in einer Simulation mit (grün) und ohne (blau) Thermokräfte.

### 5.1.6 Rückwirkung auf das Hauptplasma

Die primäre Rückwirkung von Verunreinigungen auf das Hauptplasma besteht in einer Kühlung der Elektronen  $\mathbf{P}_{cool} = 8.16 \text{ kW}$  aufgrund von Energieverlusten durch Strahlung  $\mathbf{P}_{rad} = 7.39 \text{ kW}$  und Ionisation  $\mathbf{P}_{ion} = 0.77 \text{ kW}$ (vgl Gl. (3.64)). Die Verteilungen  $P_{rad,Z}$  einer Ionensorte sowie die der gesamten Strahlungsverluste  $P_{rad, total}$  sind in Abb. 5.12 dargestellt.

Die Beiträge  $P_{\rm rad,C^{0+}}$  und  $P_{\rm ion,C^{0+}}$  werden z. Zt. im EMC3-Code vernachlässigt, was für Linienstrahlung eine gute Näherung ist ( $\mathbf{P}_{\rm rad,C^{0+}} = 1.1 \,\mathrm{W}$ ). Da der gesamte neutrale Kohlenstoff ionisiert wird, ergibt sich mit  $\Gamma_{\rm imp} = 12.9 \,\mathrm{A}$  (s. Abschnitt 5.1.1) und  $E_{\rm ion,C^{0+}} = 11.3 \,\mathrm{eV} \,\mathbf{P}_{\rm ion,C^{0+}} = 0.15 \,\mathrm{kW}$ . Das sind immerhin knapp 20% von  $\mathbf{P}_{\rm ion}$  und etwa 2% der gesamten Energieverluste  $\mathbf{P}_{\rm cool}$ .

Der Hauptbeitrag zu  $\mathbf{P}_{rad}$  wird gemäß Abb. 5.12 und Abb. 5.8 durch die  $C^{1+}$ - (15%), besonders aber  $C^{2+}$ - (40%) und  $C^{3+}$ -Ionen (33%) gestellt. Abb. 5.12 zeigt die gesamte Linienstrahlung eines Ladungszustandes  $P_{rad,Z}$ , welche sich aus den effektiven Strahlungsraten aus Kapitel 2 ergibt, sowie die Summe über alle Ladungszustände  $P_{rad, total}$ .

Die Struktur der Verteilungen  $P_{\rm rad,C^{1+}}$  bis  $P_{\rm rad,C^{3+}}$  ist ähnlich der von  $n_{\rm C^{1+}}$  bis  $n_{\rm C^{3+}}$ , allerdings sind  $P_{\rm rad,C^{1+}}$  bis  $P_{\rm rad,C^{3+}}$  in der Privaten-Flusszone stark reduziert. Das ist verständlich, da dort auch  $n_e$  reduziert ist, welches als



## KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.12:  $P_{\rm rad,C^{1+}}$  (oben links) bis  $P_{\rm rad,C^{5+}}$  (unten links) und  $P_{\rm rad, total}$  (unten rechts). Für  $P_{\rm rad, total}$  wurde die Farbskala um den Faktor 2 angepasst.

Faktor in die Strahlungsraten eingeht. Abb. 5.13 verdeutlicht noch einmal dieses Verhalten anhand den Verteilungen  $n_{C^{2+}}$  und  $P_{rad,C^{2+}}$  entlang einer kurzen und einer langen Feldlinie. Dort ist  $P_{rad,C^{2+}}$  auf der kurzen Feldlinie um den Faktor 2-3 unterdrückt.

 $C^{4+}$  (11%) und  $C^{5+}$  (0.4%) liefern hingegen einen viel kleineren Beitrag zu  $\mathbf{P}_{rad}$ , da bei diesen Ionen ein Elektron aus einer tieferen Schale angeregt werden muss. Wie aus Abb. 2.3 zu entnehmen ist, sind die Ratenkoeffizienten  $\mathcal{P}_{C^{4+}}^{(line)}$  und  $\mathcal{P}_{C^{5+}}^{(line)}$  im Bereich  $T_e = 10 - 100 \, eV$  stark temperaturabhängig.



Abbildung 5.13:  $n_{C^{2+}}$  und  $P_{rad,C^{2+}}$  entlang einer langen (durchgezogene Linie) und einer kurzen (unterbrochene Linie) Feldlinie.

Deshalb beschränken sich deren Beiträge auf die wärmsten Bereiche im Simulationsgebiet und spiegeln nicht die Struktur der Dichteverteilung wider. Ohne die Information der lokalen Plasmaparameter  $T_e$  und  $n_e$  ist es also nicht möglich, anhand einer Strahlungsverteilung einer Ionensorte (z.B. die gemessene Verteilung einer bestimmten Linie) detaillierte Rückschlüsse auf deren Dichteverteilung zu gewinnen. Für C<sup>1+</sup> bis C<sup>3+</sup> läßt sich immerhin die grobe Struktur der Verteilung bestimmen, wie ein Vergleich zwischen den Dichten in Abb. 5.3 mit den Strahlungsraten in Abb. 5.12 zeigt. Vielmehr läßt sich aber mit  $P_{\rm rad,C^{1+}}$  bis  $P_{\rm rad,C^{2+}}$  die Struktur des Magnetfeldes vor der DED-Oberfläche bestimmen, denn durch die Reduktion von  $n_e$  in der Privaten-Flusszone entsteht ein hoher Kontrast in  $P_{\rm rad,C^{1+}}$  bis  $P_{\rm rad,C^{3+}}$ , wie in Abb. 5.13 zu sehen ist. Genau dieses Verhalten wird auch im Experiment ausgenutzt (s. auch Abschnitt 5.1.8).

Einen weiteren Beitrag zur Kühlung der Elektronen stellen Energieverluste durch Ionisation dar. Diese sind in Abb. 5.14 für jede Ionensorte  $\mathbf{P}_{\text{ion},Z}$ und als Summe  $P_{\text{ion, total}}$  zu sehen. Das Maximum der Farbskalen ist im Vergleich zu Abb. 5.12 jeweils um den Faktor 10 reduziert. Die Verteilungen  $\mathbf{P}_{\text{ion},Z}$  folgen denen von  $P_{\text{rad},Z}$ , wie man aufgrund der ähnlichen Prozesses auch erwartet, und machen einen Anteil in der Größenordnung von 10% aus (s.o.).



## KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.14:  $P_{\text{ion},C^{1+}}$  (oben links) bis  $P_{\text{ion},C^{5+}}$  (unten links) und  $P_{\text{ion, total}}$  (unten rechts). Für  $P_{\text{ion, total}}$  wurde die Farbskala um den Faktor 2 angepasst.

Die Kühlung der Elektronen beträgt mit

$$\mathbf{P}_{\text{cool}} = \mathbf{P}_{\text{rad}} + \mathbf{P}_{\text{ion}} = 8.16 \,\text{kW}$$
(5.13)

gut 5% von  $\mathbf{P}_{\text{heat}} = 150 \text{ kW}$ . Allerdings erfahren nicht nur die Elektronen eine Kühlung, sondern auch die Ionen, da diese durch Stöße miteinander Energie austauschen. Dies wird in den Energie-Bilanzgleichungen durch den Term  $Q_{ie}$  (Energieübertrag auf Ionen) bzw.  $Q_{ei}$  (Energieübertrag auf Elektronen) berücksichtigt. Abb. 5.15 zeigt  $T_e$  und  $T_i$  in einem verunreinigten


Abbildung 5.15:  $T_e$  (oben links) und  $T_i$  (unten links), sowie  $\Delta T_e$  (oben rechts) und  $\Delta T_i$  (unten rechts).

Plasma, sowie die Temperaturdifferenzen

$$\Delta T_e = T_e^{\text{(impure)}} - T_e^{\text{(clean)}}, \qquad \Delta T_i = T_i^{\text{(impure)}} - T_i^{\text{(clean)}}$$

zu einem sauberen Plasma. Wegen  $T_i > T_e$  und

$$Q_{ie} \sim \frac{T_e - T_i}{T_e^{3/2}}$$
 (5.14)

bewirken Stöße zwischen Elektronen und Ionen einen effektiven Energieübertrag von Ionen auf Elektronen. Eine Kühlung der Elektronen hat damit nach Gl. (5.14) einen höheren Energieübertrag von Ionen auf Elektronen zur Folge, was zu einer weiteren Kühlung der Ionen führt.

Abb. 5.15 oben rechts zeigt die Kühlung der Elektronen  $\Delta T_e$ . Auffällig ist, dass  $T_e$  in der gesamten Plasmarandschicht abgesenkt wird und  $\Delta T_e$  nicht die Struktur von  $P_{\rm rad, \ total}$  und  $P_{\rm ion, \ total}$  aufweist. An der DED-Oberfläche liegt ein etwa 3 cm dickes *Band* an, in dem eine Kühlung durch Verunreinigungen von etwa  $\Delta T_e \approx -3 - 4 \,\mathrm{eV}$  vorliegt. Auf der Niederfeld-Seite befinden sich in diesem Band ausschließlich laminare Feldlinien, die sich auf der Hochfeld-Seite mit ergodischen vermischen. Über den schnellen parallelen Transport auf laminaren Feldlinien können die lokal vor der DED-Oberfläche entstehenden Energieverluste auf die laminare Zone verteilt werden, was zur Ausbildung der Bandstruktur in Abb. 5.15 oben rechts führt. Über lange Feldlinien findet auch ein Energieaustausch mit dem ergodischen Bereich statt, der allerdings mit  $\Delta T_e \approx -2$ eV schwächer ausfällt. Die Ursache dafür ist, dass lange Feldlinien aufgrund des ergodischen Charakters zwar mit weiten Bereichen der Randschicht in Kontakt stehen, der Energieaustausch aber durch die hohe Verbindungslänge langsamer stattfindet.

Wenden wir uns nun den indirekten Rückwirkungen von Verunreinigungen zu.  $\Delta T_i$  ist in Abb. 5.15 unten rechts zu sehen. Die indirekte Kühlung der Ionen über Stöße mit Elektronen fällt mit  $\Delta T_i \approx -1 - 2 \,\mathrm{eV}$  geringer aus als die der Elektronen.

Desweiteren gehen  $T_e$  und  $T_i$  über den Druckgradienten in die Impulsbilanz der H<sup>+</sup>-Ionen und deren Geschwindigkeit  $v_{\rm H^+}$  wiederum in deren Teilchenbilanz ein, so dass auch in diesen Verteilungen Rückwirkungen von Verunreinigungen entstehen können. Eine signifikante Änderung in den Verteilungen  $v_{\rm H^+}$  und  $n_{\rm H^+}$  wurde hier jedoch nicht beobachtet.

# 5.1.7 Modell für atomare Prozesse

Die Auswirkungen der Wahl des Modells für atomare Prozesse werden nun untersucht, indem für dieselben Inputparameter wie in Abschnitt 5.1.2 die Simulation im CR-Modell wiederholt wird. Abb. 5.16 und Abb. 5.17 zeigen die berechneten Verunreinigungsdichten im CR-Modell  $n_Z^{CR}$  (links), sowie die Differenzen

$$\Delta n_Z = n_Z^{\rm CR} - n_Z^{\rm Corona}$$

zum Korona-Modell (rechts). Aufgrund der in Kapitel 2.4 festgestellten Diskrepanzen zwischen dem Korona-Modell aus dem STRAHL-Code (ADAS 89) und dem CR-Modell (ADAS 96) bei niedrigen Dichten (was im Grenzfall  $n_e \rightarrow 0$  dem Korona-Modell entspricht) werden hier für einen fairen Vergleich zwischen beiden Modellen die Korona-Raten nach Gl. (2.13) aus dem CR-Modell bei niedrigster tabellierter Dichte  $n_e = 5 \cdot 10^7 \,\mathrm{cm}^{-3}$  gewonnen.

 $n_{\rm C^{1+}}$  und  $n_{\rm C^{2+}}$  fallen durch die höhere Ionisationrate im CR-Modell geringer aus als im Korona-Modell (blaue Bereiche in Abb. 5.16 oben und Mitte rechts). In dem kühleren Bereich vor der DED-Oberfläche endet die schnellere Ionisation meist bei C<sup>3+</sup>, so dass dort  $n_{\rm C^{3+}}$  höher ist als im Korona-Modell (rote bis gelbe Bereiche in Abb. 5.16 unten rechts). Weiter innen ist  $T_e$  höher, so dass dort auch C<sup>3+</sup>-Ionen im CR-Modell schneller ionisiert werden und damit  $n_{\rm C^{3+}}$  geringer ist als im Korona-Modell (blaue Bereiche in Abb. 5.16 unten rechts). Ebenso ist  $n_{\rm C^{4+}}$  vor der DED-Oberfläche durch schnellere



Abbildung 5.16: Dichten der Kohlenstoffionen im CR-Modell (links) und Dichtedifferenzen zum Korona-Modell (rechts) für C<sup>1+</sup> (oben), C<sup>2+</sup> (Mitte) und C<sup>3+</sup> (unten). Das Maximum der Farbskalen für die Dichte (rot) beträgt  $n_{\rm max} = 1.2 \cdot 10^{11} \,{\rm cm}^{-3}$  und für die Dichtedifferenzen (gelb bzw. hellblau)  $n_{\rm max} = \pm 1.2 \cdot 10^{10} \,{\rm cm}^{-3}$ .

Ionisation im CR-Modell leicht erhöht, aber weniger stark als  $n_{\rm C^{3+}}$  (rote Bereiche in Abb. 5.17 oben rechts). Noch weiter innen ist  $T_e$  so hoch, dass auch mehr Ionen fünffach ionisiert werden, wodurch  $n_{\rm C^{4+}}$  dort geringer ist im CR-Modell (blaue Bereiche in Abb. 5.17 oben rechts). Die  $n_{\rm C^{5+}}$  und  $n_{\rm C^{6+}}$ sind dagegen höher, wie in Abb. 5.17 Mitte und unten rechts an den roten Bereichen zu sehen ist (Man beachte aber die um den Faktor 20 angepasste



# KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.17: Dichten der Kohlenstoffionen im CR-Modell (links) und Dichtedifferenzen zum Korona-Modell (rechts) für C<sup>4+</sup> (oben), C<sup>5+</sup> (Mitte) und C<sup>6+</sup> (unten). Das Maximum der Farbskalen für die Dichte (rot) beträgt  $n_{\rm max} = 1.2 \cdot 10^{11} \,{\rm cm}^{-3}$  und für die Dichtedifferenzen (gelb bzw. hellblau)  $n_{\rm max} = \pm 1.2 \cdot 10^{10} \,{\rm cm}^{-3}$ . Für C<sup>6+</sup> wurden die Farbskalen um den Faktor 20 angepasst.

Farbskala für  $C^{6+}$ ).

Für eine quantitative Analyse sind in Abb. 5.18 die C<sup>1+</sup>- bis C<sup>4+</sup>-Dichten vor der DED-Oberfläche auf dem ersten Stück  $\Delta L = 600 \,\mathrm{cm}$  entlang ein Feldlinie dargestellt. Die maximalen Dichtedifferenzen  $\Delta n_Z$  vor der DED-Oberfläche, sowie die relativen lokalen Änderungen sind in folgender Tabelle



Abbildung 5.18:  $n_{C^{1+}}$  bis  $n_{C^{4+}}$  entlang einer Feldlinie (die ersten  $\Delta L = 600 \text{ cm}$  vor der DED-Oberfläche) im Korona- (unterbrochene Linie) und im CR-Modell (durchgezogene Linie).

zu sehen.

Ionensorte	$\Delta n_Z  \left[ 10^{10}  \mathrm{cm}^{-3} \right]$
$C^{1+}$	-0.47(-6%)
$C^{2+}$	-1.12(-8%)
$C^{3+}$	+0.63(+8%)
$C^{4+}$	+0.40(+8%)

Weiter innen dreht sich das Verhalten von  $n_{\rm C^{3+}}$  und  $n_{\rm C^{4+}}$  (wie schon besprochen wurde) um. Dort ist  $\Delta n_{\rm C^{3+}} = -0.15 \cdot 10^{10} \,{\rm cm^{-3}} \,(-8\,\%)$  und  $\Delta n_{\rm C^{4+}} = -0.39 \cdot 10^{10} \,{\rm cm^{-3}} = -\Delta n_{\rm C^{5+}} \,(-8\,\%)$  (vgl. Abb. 5.17).

Mit der lokalen Umverteilung der Ladungszustände ergibt sich auch eine Umverteilung im totalen Gehalt  $M_Z$  und den zugehörigen Strahlungsverlusten  $\mathbf{P}_{\rm rad}$ <sup>3</sup>, welche beide Abb. 5.19 zeigt und nochmals in folgender Tabelle aufgelistet sind.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Hier enthalten die Strahlungsverluste auch den Anteil durch  $\mathcal{P}_Z^{(\text{rec})}$  (s. Kapitel 2.3.1 auf Seite 9), weshalb auch C<sup>6+</sup> einen Beitrag liefert.



Abbildung 5.19: Totaler Gehalt (durchgezogene Linie)  $M_Z$  und zugehörige Strahlungsverluste  $P_{\text{rad},Z}$  (unterbrochene Linie) im CR- und im Korona-Modell.

Ionensorte	$M_Z^{( m corona)} \left[\mu g\right]$	$\mathbf{P}_{\mathrm{rad}}^{(\mathrm{Corona})}\left[\mathrm{W} ight]$
$C^{1+}$	0.050(+4%)	816(+13%)
$C^{2+}$	0.097(+11%)	2785(+35%)
$C^{3+}$	0.110(-1%)	3080(+3%)
$C^{4+}$	0.565(+4%)	271(+1%)
$C^{5+}$	0.004(-23%)	10(-23%)
$C^{6+}$	$8 \cdot 10^{-4} (-20\%)$	0.05(-21%)

Insgesamt ergibt sich mit  $M_{\rm imp} = 0.86 \,\mu {\rm g}$  im Korona-Modell ein totaler Verunreinigungsgehalt, der um 2% größer ist als im CR-Modell ( $M_{\rm imp} = 0.84 \,\mu {\rm g}$ ). Die Strahlungsverluste von  $P_{\rm rad} = 6.96 \,{\rm kW}$  im Korona-Modell werden im Vergleich zum CR-Modell mit  $P_{\rm rad} = 6.05 \,{\rm kW}$  um 15% überschätzt.

Eine Gegenüberstellung zum Korona-Modell aus dem STRAHL-Code zeigt eine ähnliche Orts-Verteilung der Ladungszustände, allerdings fallen die zugehörigen Strahlungsverluste viel größer aus. Mit dem STRAHL-Modell ergeben sich Strahlungsverluste von  $P_{\rm rad} = 7.39 \,\rm kW$  (s. voriger Unterabschnitt), d.h. es liegt eine Überschätzung von 22 % vor.

#### 5.1.8 Vergleich mit dem Experiment

Abb. 5.20 zeigt die Strahlungsverteilung der Linie  $\lambda = 465.0 \text{ nm} \text{ von } \text{C}^{2+}$ vor der DED-Oberfläche. Da für den modellierten TEXTOR-Schuss keine experimentell gemessenen Strahlungsverteilungen von Kohlenstoff vorhanden sind, kann dieser Abschnitt lediglich demonstrieren, dass ein Vergleich mit dem Experiment jetzt prinzipiell möglich ist. In Abb. 5.20 unten rechts ist deshalb eine gemessene Strahlungsverteilungen derselben Linie<sup>4</sup> in einem Schuss mit einer ähnlichen Magnetfeldkonfiguration und demselben q-Wert am Rand gezeigt.



Abbildung 5.20: Strahlungsverteilung der Linie  $\lambda = 465.0 \text{ nm}$  von C<sup>2+</sup> aus einer numerischen Rechnung (oben) sowie aus Messungen am Experiment [30] für q = 3.5 (links) und q = 3.7 (rechts) bei  $\varphi = 90^{\circ}$ .

Es ist deutlich zu sehen, dass die gemessenen und numerisch berechneten Verteilungen nicht übereinstimmen. Zum Vergleich ist in Abb. 5.20 unten links eine gemessene Strahlungsverteilung bei einem kleineren q-Wert zu sehen, welche viel besser mit den numerischen Rechnungen übereinstimmt.

Genauere Vergleiche mit dem Experiment müssen auf eine Anschlußarbeit verschoben werden, insbesondere wenn in Zukunft MHD-Gleichgewichtsrechnungen mit dem EFIT-Code möglich werden (s. Kapitel 4.3.1 auf Seite 41).

 $<sup>^4</sup>$ In den Strahlungsverteilungen aus dem Experiment wird die  $\lambda=465.0 \rm nm$ Linie von  $\rm C^{2+}$  mit CIII bezeichnet.

# 5.2 Variation von Inputparametern

In diesem Abschnitt wird der Einfluss verschiedener Parameter auf Verunreinigungen und deren Rückwirkung auf das Plasma untersucht. Dazu werden die kontinuierlichen Inputparameter  $n_{\rm in}$ ,  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  und  $D_{\perp}$  (s. Tab. 4.2) variiert. Desweiteren wird auch bei anderen Inputparametern die Unterschiede zwischen Korona- und CR-Modell untersucht.

# 5.2.1 Plasmadichte

Zunächst wird nur die Dichte auf der inneren Begrenzung  $n_{\rm in}$  variiert und der senkrechte Transportkoeffizienten  $D_{\perp} = 0.9 \cdot 10^4 \,{\rm cm}^2 s^{-1}$  sowie die Heizleistung  $\mathbf{P}_{\rm heat} = 150 \,{\rm kW}$  konstant gehalten. Bevor wir uns die Simulationsergebnisse für die Kohlenstoffionen anschauen, betrachten wir zunächst einmal die Elektronendichte  $n_e$ , welche neben der Temperatur  $T_e$  das Ionisationsgleichgewicht für die Kohlenstoffionen bestimmt.

#### Elektronendichte



Abbildung 5.21:  $n_e$  für  $n_{\rm in} = 1.36 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$  (links) und  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$  (rechts). Das Maximum der Farbskala (rot) entspricht einer Dichte von  $n_{\rm max} = 3.2 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$ .

Abb. 5.21 zeigt  $n_e$  zum Vergleich bei zwei verschiedenen Inputparametern  $n_{\rm in}$ . Dort ist erkennbar, dass bei hoher Dichte  $n_{\rm in}$  erwartungsgemäß auch die Dichte direkt vor der DED-Oberfläche  $n_{\rm Target}$ , sowie die Dichte in den ergodischen Fingern auf der Hochfeld-Seite  $n_{\rm Finger}$ , höher sind. Dies bestätigt Abb. 5.22, wo neben  $n_{\rm Finger}$  und  $n_{\rm Target}$  auch der Recyclingfluss  $\Gamma_{\rm rec}$  zu sehen ist. Bei einer Verdopplung von  $n_{\rm in}$  erhöht sich  $n_{\rm Finger}$  um 244 %,  $n_{\rm Target}$  jedoch nur um 131 %, was in folgender Tabelle noch einmal aufgelistet ist:



Abbildung 5.22: Dichte vor der DED-Oberfläche  $n_{\text{Target}}$ , maximale Dichte in den ergodischen Fingern  $n_{\text{Finger}}$  sowie Recyclingfluss  $\Gamma_{\text{rec}}$  bei verschiedenen Inputparametern  $n_{\text{in}}$ .

$n_{\rm in}  [10^{13}  {\rm cm}^{-3}]$	$n_{\rm Finger}  [10^{13}  {\rm cm}^{-3}]$	$n_{\rm Target}  [10^{13}  {\rm cm}^{-3}]$	$\Gamma_{\rm rec}[{\rm kA}]$
1.36	0.88	0.49	0.62
2.72	3.03	1.13	1.25

#### Verunreinigungsquelle und -transport

 $\Gamma_{\rm rec}$ - und damit  $\Gamma_{\rm imp}$ - verhält sich ebenso wie  $n_{\rm Target}$  in etwa linear (abgesehen vom höchsten Dichtewert  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$ ), was in Abb. 5.22 gezeigt ist. Es gibt eine Zunahme von 103 %, d.h.  $\Gamma_{\rm imp}$  wird bei Verdopplung von  $n_{\rm in}$  auch verdoppelt, was ebenfalls in der Tabelle weiter oben aufgelistet ist.

In Abb. 5.23 und Abb. 5.24 sind die Kohlenstoffdichten  $n_{\rm C^{1+}}$  bis  $n_{\rm C^{6+}}$  bei niedrigem  $n_{\rm in} = 1.36 \cdot 10^{13} \,{\rm cm^{-3}}$  und hohem  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,{\rm cm^{-3}}$  dargestellt, wobei das CR-Modell für atomare Prozesse verwendet wurde. In beiden Abbildungen wurde zum besseren Vergleich eine logarithmische Farbskala verwendet, deren Maximum (rot)  $n_{\rm max} = 3.5 \cdot 10^{11} \,{\rm cm^{-3}}$  und Minimum (weiß)  $n_{\rm min} = 3.5 \cdot 10^7 \,{\rm cm^{-3}}$  beträgt.

Deutlich zu erkennen ist die Dominanz von C<sup>4+</sup> in weiten Teilen des Simulationsgebietes (s. Abb. 5.23 und Abb. 5.24 jeweils Mitte rechts). Der mittlere Anteil von C<sup>4+</sup> beträgt in allen Simulationen etwa  $c_4 \approx 0.65 - 0.66$ . Vor der



# KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.23:  $n_{\rm C^{1+}}$  (oben links) bis  $n_{\rm C^{6+}}$  (unten rechts) bei 1112. Die logarithmische Farbskala reicht von  $n_{\rm min} = 3.5 \cdot 10^7 \,{\rm cm^{-3}}$  (weiß) bis  $n_{\rm max} = 3.5 \cdot 10^{11} \,{\rm cm^{-3}}$  (rot).

DED-Oberfläche sind auch C<sup>1+</sup>- bis C<sup>3+</sup>-Ionen lokal stärker vertreten, hervorgerufen durch den ständigen Nachschub an neutralem Kohlenstoff, der an der DED-Oberfläche entsteht. Bei einer Verdopplung von  $n_{\rm in}$  (s.o.) steigen deren Dichten in den Streifen direkt vor der DED-Oberfläche stark an:

$n_{\rm in} \left[ 10^{13}  {\rm cm}^{-3} \right]$	$n_{\rm C^{1+}}  [10^{11}  {\rm cm^{-3}}]$	$n_{\rm C^{2+}}  [10^{11}  {\rm cm^{-3}}]$	$n_{\rm C^{3+}}  [10^{11}  {\rm cm^{-3}}]$
1.36	0.7	1.5	1.0
2.72	3.5	3.3	1.5



Abbildung 5.24:  $n_{\rm C^{1+}}$  (oben links) bis  $n_{\rm C^{6+}}$  (unten rechts) bei 1512. Die logarithmische Farbskala reicht von  $n_{\rm min} = 3.5 \cdot 10^7 \,{\rm cm^{-3}}$  (weiß) bis  $n_{\rm max} = 3.5 \cdot 10^{11} \,{\rm cm^{-3}}$  (rot).

Desweiteren ist deutlich, dass mit zunehmendem  $n_{\rm in} n_{\rm C^{5+}}$  und  $n_{\rm C^{6+}}$  stark abnehmen (vgl. Abb. 5.23 und Abb. 5.24 jeweils unten links und rechts).

Diese Änderungen in den Verteilungen der Kohlenstoffionen sind in dem komplexen Zusammenspiel zwischen Ionisations-, Rekombinations- und Transportprozessen begründet. Ionisationsraten hängen stark von  $T_e$  ab, welches in Abb. 5.27 Mitte für die beiden genauer betrachteten Dichten zu sehen ist. Bei hohem  $n_{\rm in}$  ist dort eine Abkühlung im gesamten Simulationsgebiet zu erkennen. Die Durchschnittstemperatur auf der inneren Begrenzung sinkt

von  $T_e^{(\text{in})} = 114.7 \text{ eV}$  auf  $T_e^{(\text{in})} = 65.1 \text{ eV}$  und die an der DED-Oberfläche von  $T_e^{(\text{Target})} = 19.0 \text{ eV}$  auf  $T_e^{(\text{Target})} = 9.0 \text{ eV}$ . Dieses Verhalten ist dadurch erklärbar, dass bei konstant gehaltenem  $\mathbf{P}_{\text{heat}}$  und zunehmendem  $n_{\text{in}}$  die zur Verfügung stehende Energie auf mehr Teilchen verteilt werden muss. Die Ionentemperatur  $T_i$  verhält sich aus dem gleichen Grund ähnliche, wird hier aber nicht mehr explizit gezeigt.



Abbildung 5.25: Mittlerer Anteil  $c_Z$  der Ladungszustände von Kohlenstoff am gesamten Kohlenstoffgehalt

Bei einer Verringerung von  $T_e$  (in Folge einer Verdopplung von  $n_{in}$ , s.o.) verschiebt sich das mittlere Ionisationsgleichgewicht zu niedrigeren Ladungszuständen hin (s. Abb. 5.25). Die Änderungen der Anteile  $c_Z$  eines Ladungszustandes Z sind in folgender Tabelle aufgelistet:

$n_{\rm in}  [10^{13}  {\rm cm}^{-3}]$	$c_{\mathrm{C}^{1+}}$	$c_{\mathrm{C}^{2+}}$	$c_{\mathrm{C}^{5+}}$	$c_{\rm C^{6+}}$
1.36	0.057	0.105	0.058	0.001
2.72	0.077	0.119	0.006	$7 \cdot 10^{-6}$

 $c_{\rm C^{1+}}$  nimmt um 35 % und  $c_{\rm C^{2+}}$  um 13 % zu, während  $c_{\rm C^{3+}}$  und  $c_{\rm C^{4+}}$  in etwa konstant bleiben (+1 – 2 %). Letzteres ist dadurch begründet, dass die Übergänge zwischen den oberen Ladungszuständen (bei den hier vorliegenden  $T_e$ ) durch Rekombination mitbestimmt sind (vgl. Abb. 2.1 auf Seite 12 und Abb. 2.2 auf Seite 13), welche mit abnehmendem  $T_e$  zunimmt. Deshalb bewirkt eine Verringerung von  $T_e$  eine zusätzliche Abnahme von  $c_{\rm C^{5+}}$  (-90 %) und  $c_{\rm C^{6+}}$  (-99 %), was eine Änderung von  $c_{\rm C^{3+}}$  und  $c_{\rm C^{4+}}$  ausgleicht.

Insgesamt steigt der Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  bei Verdopplung von  $n_{\rm in}$ 



Abbildung 5.26: Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  und Strahlungsverluste  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  bei verschiedenen Dichten  $n_{\rm in}$  im Korona-Modell (unterbrochene Linie) und im CR-Modell (durchgezogene Linie).

nur schwach an, von  $M_{\rm imp} = 0.84 \,\mu {\rm g}$  (bei  $n_{\rm in} = 1.36 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$ ) um 15% auf  $M_{\rm imp} = 0.97 \,\mu {\rm g}$  (bei  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$ ), obwohl die Verunreinigungsquelle  $\Gamma_{\rm imp}$  viel stärker ansteigt (etwa um den Faktor 2, vgl. Abb. 5.26 und Abb. 5.22). Der Grund dafür ist eine höhere Einschlusszeit der C<sup>4+</sup>- bis C<sup>6+</sup>-Ionen, da diese durch Thermokräfte viel stärker zum Kernplasma hingezogen werden als C<sup>1+</sup>- bis C<sup>3+</sup>-Ionen (s. Abschnitt 5.1.5). Eine Änderung von  $T_e$  bewirkt somit auch eine Änderung der mittleren Einschlusszeit von Verunreinigungen, was  $M_{\rm imp}$  auf komplexe Weise abhängig macht von den lokalen Plasmaparametern.

Ein in etwa konstant bleibendes  $M_{\rm imp}$  und zunehmende Dichte bedeutet eine Abnahme der Verunreinigungskonzentration  $c_{\rm imp}$  und damit eine geringere Verdünnung der H<sup>+</sup>-Komponente des Plasmas. Genau dieses Verhalten ist auch im Experiment zu beobachten.

## Strahlungsverluste und Kühlung der Elektronen durch Verunreinigungen

Wie schon in Abschnitt 5.1.6 beschrieben, wird das Plasma, bzw. primär die Elektronen, aufgrund von Energieverlusten durch Strahlung  $\mathbf{P}_{rad}$  (und Ionisation  $\mathbf{P}_{ion}$ ) von Verunreinigungen gekühlt (s. Abschnitt 5.1.6). Die Ver-



# KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.27: Strahlungsverluste durch Verunreinigungen  $P_{\rm rad}$  (oben) mit logarithmischer Farbskala, Elektronentemperaturen  $T_e$  eines verunreinigten Plasmas (Mitte) und durch Verunreinigungen verursachte Kühlung  $\Delta T_e$  (unten) für  $n_{\rm in} = 1.36 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$  (links) und  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$  (rechts).

teilung von  $P_{\rm rad}$  wird in Abb. 5.27 oben für zwei verschiedene  $n_{\rm in}$  gegenübergestellt. Deutlich zu erkennen ist die starke Zunahme von  $P_{\rm rad}$  in den ergodischen Fingern vor der DED-Oberfläche bei hohem  $n_{\rm in}$ :

$n_{\rm in}  [10^{13}  {\rm cm}^{-3}]$	$P_{\rm rad}  [{\rm W}  {\rm cm}^{-3}]$	$\mathbf{P}_{\mathrm{rad}}\left[\mathrm{kW} ight]$
1.36	0.20	6.0
2.72	1.23	19.9

Insgesamt steigen die totalen Strahlungsverluste im Simulationsgebiet um +229% (s. Abb. 5.26). Diese starke Zunahme von  $\mathbf{P}_{rad}$  ist durch die oben beschriebene Verschiebung im Ionisationsgleichgewicht begründet und liegt an den unterschiedlichen Strahlungseigenschaften der verschiedenen Ladungszustände. Die unteren Ladungszustände von Kohlenstoff strahlen viel stärker als die oberen, deshalb ist  $\mathbf{P}_{rad}$  hier bei niedriger Temperatur höher. Mit  $n_{in}$  ist auch  $n_e$  im Simulationsgebiet höher (s. Abb. 5.21), und da  $n_e$  als Faktor in  $P_{rad}$  enthalten ist, entsteht eine sehr starke Zunahme von  $P_{rad}$ .

Mit zunehmendem  $\mathbf{P}_{rad}$  nehmen auch die Temperaturänderungen  $\Delta T_e$  zu einem sauberen Plasma zu (Abb. 5.27 unten). Bei niedrigem  $T_e$  (Abb. 5.27 rechts) fällt auf, dass  $\Delta T_e$  die Struktur von  $P_{rad}$  annimmt, mit abnehmendem  $T_e$  auch der Energietransport abnimmt ( $\kappa_{\parallel} \propto T^{5/2}$ , vgl. Kapitel 3) und daher die (lokal vor der DED-Oberfläche entstehenden) Energieverluste nicht mehr vollständig ausgeglichen werden können. Die Kühlung vor der DED-Oberfläche beträgt dort bis zu  $\Delta T_e = -5.2 \,\text{eV}$ , was einen erheblichen Anteil der dortigen Temperatur  $T_e^{(\text{Target})} = 9.0 \,\text{eV}$  ausmacht!

#### Korona- und CR-Modell bei höheren Dichten

Im Folgenden wird untersucht, welche Unterschiede sich zwischen Koronaund CR-Modell bei höheren Dichten ergeben. Abb. 5.28 zeigt dazu die Differenzen

$$\Delta n_Z = n_Z^{\rm CR} - n_Z^{\rm Corona}$$

für eine Vergleichsrechnung bei  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ . Für eine genauere Untersuchung der Dichten vor der DED-Oberfläche sind in Abb. 5.29 zusätzlich  $n_Z^{\rm CR}$  und  $n_Z^{\rm Corona}$  für C<sup>1+</sup> bis C<sup>4+</sup> entlang einer Feldlinie gezeigt. Die maximalen absoluten Differenzen sind in Folgender Tabelle zusammengefasst:

IONENSORTE	$\Delta n_Z  [10^{10}  \mathrm{cm}^{-3}]$
$C^{1+}$	-5.86  (-25%)
$C^{2+}$	-6.76 $(-23%)$
$C^{3+}$	+4.69 (+52%)
$C^{4+}$	+0.86 (+19%)

Im Bereich weiter innen (nicht mehr entlang der Feldlinie in Abb. 5.29 zu erkennen) sind  $n_{\mathrm{C}^{3+}}^{\mathrm{CR}}$  und  $n_{\mathrm{C}^{4+}}^{\mathrm{CR}}$  aufgrund höherer Ionisation bei höherem  $T_e$  geringer als  $n_{\mathrm{C}^{3+}}^{\mathrm{Corona}}$  und  $n_{\mathrm{C}^{4+}}^{\mathrm{Corona}}$  (s. Abb. 5.28 Mitte):

$$\begin{array}{rcl} \Delta n_{\rm C^{3+}} &\approx& -1.5 \cdot 10^{10} \, {\rm cm^{-3}} \\ \Delta n_{\rm C^{4+}} &\approx& -0.5 \cdot 10^{10} \, {\rm cm^{-3}} \end{array}$$

#### KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT



Abbildung 5.28: Dichtedifferenzen  $\Delta n_{\rm C^{1+}}$  bis  $\Delta n_{\rm C^{4+}}$  zwischen CR-Modell und Korona-Modell. Maximum (gelb) und Minimum (hellblau) der Farbskalen entsprechen Dichtedifferenzen von  $\Delta n = \pm 7 \cdot 10^{10} \,\mathrm{cm^{-3}}$ . Aufgrund der sehr geringen Dichten der C<sup>5+</sup>- und C<sup>6+</sup>-Ionen bei  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm^{-3}}$ (vgl. Abb. 5.24 unten) wurden deren Dichtedifferenzen hier weggelassen. Die totale Änderung ist in Abb. 5.30 zu sehen.

Eine Umverteilung der Ladungszustände zieht ebenso auch wieder eine Umverteilung der zugehörigen Strahlungsverluste nach sich (s. Abb. 5.30).  $M_{\rm C^{1+}}$  (+18 %) und  $M_{\rm C^{2+}}$  (+27 %) nehmen im Korona-Modell zu, die zugehörigen Strahlungsverluste  $P_{\rm rad,C^{1+}}$  (+46%) und  $P_{\rm rad,C^{2+}}$  (+75%) nehmen aber aufgrund der höheren Strahlungsraten im Korona-Modell stärker zu. An der Menge und den Strahlungsverlusten von C<sup>3+</sup>- und C<sup>4+</sup>-Ionen ändert sich kaum etwas, es gibt lediglich eine Umverteilung im Aufenthaltsort (s.o.).  $M_{\rm C^{5+}}$  (-41%) und  $M_{\rm C^{6+}}$  (-88%) sind hingegen im Korona Modell geringer, so auch deren Strahlungsverluste.

Insgesamt ist  $M_{\rm imp} = 1.03 \,\mu {\rm g}$  im Korona-Modell um 6% höher als im CR-Modell mit  $M_{\rm imp} = 0.97 \,\mu {\rm g}$ .  $P_{\rm rad} = 26.57 \,{\rm kW}$  wird im Korona-Modell anstelle von  $P_{\rm rad} = 19.89 \,{\rm kW}$  im CR-Modell um 34% überschätzt.

Eine Vergleichsrechnung, die im alten Korona-Modell aus dem STRAHL-Code durchgeführt wurde, ergibt wieder in etwa dieselbe Ortsverteilung



Abbildung 5.29:  $n_{C^{1+}}$  bis  $n_{C^{4+}}$  entlang einer Feldlinie auf den ersten  $\Delta L = 1200 \text{ cm}$  vor der DED-Oberfläche im Korona- (unterbrochene Linie) und im CR-Modell (durchgezogene Linie).

für Kohlenstoffionen.  $P_{\rm rad} = 37.39 \,\rm kW$  ist jedoch weitaus größer, was eine Überschätzung von 88% gegenüber dem CR-Modell bedeutet (s. auch Abb. 5.26).

# 5.2.2 Heizleistung

Im vorigen Abschnitt wurde die Dichte auf der inneren Simulationsbegrenzung  $n_{\rm in}$  variiert, wobei die Heizleistung  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  konstant gehalten wurde. Dabei wurde eine Abkühlung der Randschicht mit zunehmender Dichte  $n_{\rm in}$ beobachtet. Im Folgenden werden Simulationen für zwei Dichtewerte wiederholt, wobei das Verhältnis  $n_{\rm in}/\mathbf{P}_{\rm heat}$  konstant gelassen wird.

Abb. 5.31 zeigt den Recyclingfluss  $\Gamma_{\rm rec}$  bei verschiedenen Dichten und Heizleistungen. Dort ist zu sehen, dass  $\Gamma_{\rm rec}$  bei konstant gehaltenem  $n_{\rm in}/\mathbf{P}_{\rm heat}$ stärker ansteigt als bei konstant gehaltenem  $\mathbf{P}_{\rm heat}$ , was auch in Folgender Tabelle zusammengefasst ist:

$n_{\rm in} \left[ 10^{13}  {\rm cm}^{-3} \right]$	$\mathbf{P}_{heat} \ [kW]$	$\Gamma_{\rm rec}[{\rm kA}]$
1.36	150	0.65
2.72	150	1.28
2.72	300	1.81



Abbildung 5.30: Totaler Gehalt (durchgezogene Linie)  $M_Z$  und zugehörige Strahlungsverluste  $P_{\text{rad},Z}$  (unterbrochene Linie) im CR- und im Korona-Modell.

Das liegt daran, dass  $T_e$  in der Randschicht bei  $\mathbf{P}_{\text{heat}} = 300 \,\text{kW}$  höher ist als bei  $\mathbf{P}_{\text{heat}} = 150 \,\text{kW}$  und gleichem  $n_{\text{in}} = 2.72 \cdot 10^{13} \,\text{cm}^{-3}$ . Damit steigt die Ionisationsrate von H-Atomen, die somit früher ionisiert und schneller wieder zurück zur DED-Oberfläche gelangen.

Wegen Gl. (5.1) nimmt mit  $\Gamma_{\rm rec}$  auch  $\Gamma_{\rm imp}$  zu, was zu einer Erhöhung von  $M_{\rm imp}$  führt (s. Abb. 5.32). Ein Vergleich bei  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$  zwischen  $\mathbf{P}_{\rm heat} = 150 \,{\rm kW}$  und  $\mathbf{P}_{\rm heat} = 300 \,{\rm kW}$  zeigt einen Anstieg von  $M_{\rm imp} = 0.97 \,{\mu}{\rm g}$  auf  $M_{\rm imp} = 1.19 \,{\mu}{\rm g}$  (+23%). Der relative Anstieg von  $M_{\rm imp}$  fällt allerdings nicht so stark aus wie der von  $\Gamma_{\rm rec}$ .

Abb. 5.33 zeigt die Besetzung der Ladungszustände und die zugehörige Verteilung der Strahlungsverluste bei  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \, {\rm cm}^{-3}$  für zwei verschiedene Werte von  $\mathbf{P}_{\rm heat}$ . Der Anteil der unteren drei Ladungszustände (C<sup>1+</sup> bis C<sup>3+</sup>) nimmt von  $c_{123} = 0.33$  bei  $\mathbf{P}_{\rm heat} = 150 \, {\rm kW}$  auf  $c_{123} = 0.24$  (-26%) bei  $\mathbf{P}_{\rm heat} = 300 \, {\rm kW}$  ab, wohingegen der Anteil der oberen drei Ladungszustände (C<sup>4+</sup> bis C<sup>6+</sup>) entsprechend von  $c_{456} = 0.67$  auf  $c_{456} = 0.76$  zunimmt. Da vorwiegend Ionen im niedrigen Ladungszustand strahlen, führt dies insgesamt zu einer Verringerung von  $\mathbf{P}_{\rm rad}$ . Die Beiträge der oberen Ladungszustände (C<sup>4+</sup> bis C<sup>6+</sup>) steigen zwar von  $P_{456}^{\rm (rad)} = 0.084 \, {\rm kW}$  auf  $P_{456}^{\rm (rad)} = 0.797 \, {\rm kW}$  an (+845%), machen aber insgesamt nur einen geringen Anteil aus. Die Beiträge der unteren Ladungszustände (C<sup>1+</sup> bis C<sup>3+</sup>) neh-



Abbildung 5.31: Recyclingfluss  $\Gamma_{\rm rec}$  bei verschiedenen Dichten  $n_{\rm in}$  für konstantes  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  (grün) und für konstantes  $n_{\rm in}/\mathbf{P}_{\rm heat}$  (blau).



Abbildung 5.32: Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  bei verschiedenen Dichten  $n_{\rm in}$  für konstantes  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  (grün) und für konstantes  $n_{\rm in}/\mathbf{P}_{\rm heat}$  (blau).

men dagegen von  $P_{123}^{\rm (rad)} = 19.8\,\rm kW$  auf  $P_{123}^{\rm (rad)} = 17.3\,\rm kW$  ab $(-13\,\%),$  was zusammengenommen zu einer Verringerung von 9% auf ${\bf P}_{\rm rad} = 18.1\,\rm kW$ 



Abbildung 5.33: Besetzung der Ladungszustände  $c_Z$  (durchgezogene Linie) und zugehörige Strahlungsverluste  $P_{\text{rad},Z}$  (unterbrochene Linie) bei  $n_{\text{in}} = 2.72 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$  für zwei verschiedene  $\mathbf{P}_{\text{heat}}$ : 600 kW (grün) und 1200 kW (blau).

führt. Trotz Erhöhung von  $M_{\rm imp}$  nimmt also  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  insgesamt aufgrund der Verschiebung im Ionisationsgleichgewicht ab.

Eine Vergleichsrechung im Korona-Modell (hier im alten Korona-Modell des STRAHL-Codes) ergibt  $M_{\rm imp} = 1.24 \mu {\rm g} \, (+5 \, \%)$  und  ${\bf P}_{\rm rad} = 26.6 \, {\rm kW} \, (+47 \, \%)$ . Die Überschätzung fällt demnach nicht so stark aus wie bei gleichem  $n_{\rm in}$  und niedrigerem  $T_e$ .

### 5.2.3 Senkrechter Teilchentransport

Der senkrechte Teilchentransport wurde bereits in Abschnitt 5.1.2 für einen separaten Transportkoeffizienten für Verunreinigungen untersucht. In diesem Abschnitt wird ein gemeinsamer Transportkoeffizient  $D_{\perp}$  für alle Ionensorten angenommen und der Einfluss einer Änderungen des konsistenten Hauptplasmas auf  $\Gamma_{\rm imp}$  und  $M_{\rm imp}$  untersucht.

In den durchgeführten Simulationen wird der starke Einfluss des senkrechten Transports auf die Dichte- und Temperaturverteilungen des Hauptplasmas deutlich. Abb. 5.34 zeigt dazu radiale  $n_e$  und  $T_e$ -Profile bei verschiedenen Koeffizienten  $D_{\perp}$ . Der poloidale Winkel für die radialen Profile wurden so

gewählt, dass die Profile durch einen Streifen mit hoher Dichte vor der DED-Oberfläche verlaufen (vgl. Abb. 5.1 oben links).



Abbildung 5.34: Radiale Profile von  $n_e$  (links) und  $T_e$  (rechts) bei verschiedenen  $D_{\perp}$ . Als poloidaler Winkel wurde  $\vartheta = 179^{\circ}$  gewählt.

Eine Erhöhung von  $D_{\perp}$  führt zu einer Abflachung des Dichteprofils (s. Abb. 5.34 links), was bei konstant gehaltenem  $n_{\rm in} = 1.36 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$  einen viel schwächeren Abfall der Dichte zum Rand hin bedeutet. Bei hohem senkrechten Transport  $(D_{\perp} = 1.8 \cdot 10^4 \,\mathrm{cm}^2 \,\mathrm{s}^{-1})$  fällt die Dichte vor der DED-Oberfläche  $n_{\rm Target}$  auf 61 % von  $n_{\rm in}$  ab, und bei niedrigem senkrechten Transport  $(D_{\perp} = 0.45 \cdot 10^4 \,\mathrm{cm}^2 \,\mathrm{s}^{-1})$  auf 29 % (s. Abb. 5.34). Tab. 5.1 belegt die genauen Werte.

$D_{\perp} [10^4 \mathrm{cm}^2 \mathrm{s}^{-1}]$	$n_{\rm Target}  \left[ 10^{13}  {\rm cm}^{-3} \right]$	$\Gamma_{ m rec}\left[A\right]$	$M_{\rm imp}  [\mu g]$
0.45	0.40	417	0.73
0.9	0.52	616	0.84
1.8	0.83	877	1.13

Tabelle 5.1: Elektronendichte vor der DED-Oberfläche  $n_{\text{Target}}$  (vgl. Abb. 5.34), Recyclingfluss  $\Gamma_{\text{rec}}$  und Verunreinigungsgehalt  $M_{\text{imp}}$  (vgl. Abb. 5.35) bei verschiedenen Koeffizienten  $D_{\perp}$ .

Der höhere senkrechten Transport und die höhere Dichte bewirkt auch einen höheren Teilchenfluss auf die Wand  $\Gamma_{\rm rec}$  (s. Abb. 5.35 und Tab. 5.1).  $\Gamma_{\rm rec}$ nimmt bei hohem senkrechten Transport ( $D_{\perp} = 1.8 \cdot 10^4 \,{\rm cm}^2 \,{\rm s}^{-1}$ ) gegenüber niedrigem senkrechten Transport ( $D_{\perp} = 0.45 \cdot 10^4 \,{\rm cm}^2 \,{\rm s}^{-1}$ ) um 111% zu. Der Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  nimmt dagegen nur um 56% zu, wie in Abb. 5.35 und Tab. 5.1 veranschaulicht wird. Die Zunahme von  $M_{\rm imp}$  fällt also deutlich geringer aus als die Zunahme der Verunreinigungsquelle vermuten läßt. Dies kann aber erklärt werden, wenn man bedenkt, dass  $T_e$  bei höherer Dichte und gleichem  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  niedriger ist (s. Abb. 5.34).

Eine Verringerung von  $T_e$  hat gleichzeitig auch eine Verschiebung im Ionisationsgleichgewicht zur Folge, bei der die unteren Ladungszustände (C<sup>1+</sup> bis C<sup>3+</sup>) stärker besetzt sind:  $c_{123} = 0.30$  bei  $D_{\perp} = 1.8 \cdot 10^4 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  anstelle von



Abbildung 5.35: Recyclingfluss  $\Gamma_{\rm rec}$  (grün) und Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  (blau) bei verschiedenen Koeffizienten  $D_{\perp}$ .

 $c_{123} = 0.25$  bei  $D_{\perp} = 0.45 \cdot 10^4 \,\mathrm{cm}^2 \,\mathrm{s}^{-1}$ . Da die unteren Ladungszustände stärker vor der DED-Oberfläche lokalisiert sind und nicht so stark durch Thermokräfte zum Kernplasma hingezogen werden, ist auch deren mittlere Einschlusszeit kürzer. Dies wirkt einer Erhöhung von  $\Gamma_{\rm imp}$  durch eine Erhöhung von  $D_{\perp}$  entgegen, und erklärt, warum  $M_{\rm imp}$  nicht so stark zunimmt.

Vergleichsrechnungen im Korona-Modell des STRAHL-Codes zeigen, dass  $M_{\rm imp}$  mit 2–3% leicht und  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  mit 13–37% stärker überschätzt werden, was in Folgender Tabelle zusammengefasst ist:

	STRAHL-	Model	CR-Model	
$D_{\perp}  [10^4  \mathrm{cm}^2  \mathrm{s}^{-1}]$	$M_{\rm imp} \left[ \mu {\rm g} \right]$	$\mathbf{P}_{\mathrm{rad}}\left[\mathrm{kW} ight]$	$M_{\rm imp} \left[ \mu {\rm g} \right]$	$\mathbf{P}_{rad}\left[\mathrm{kW}\right]$
0.45	0.75	4.0	0.73	3.5
1.8	1.17	15.8	1.13	11.6

Dieselbe Parameterstudie für  $D_{\perp}$  wurde bei  $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$  wiederholt. Für  $D_{\perp} = 1.8 \cdot 10^4 \,{\rm cm}^2 \,{\rm s}^{-1}$  hat sich dabei gezeigt, dass die Rechnungen im STRAHL-Korona-Modell instabil werden und nicht konvergieren. Es bildet sich ein kalter und dichter Bereich, der in Folge mehrerer Iterationsschritte in poloidaler Richtung durch das Simulationsgebiet wandert. Die Gesamtwerte  $M_{\rm imp}$  und  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  bleiben über mehrere Iterationsschritte gemittelt etwa gleich und werden gegenüber dem CR-Modell stark überschätzt:  $M_{\rm imp} = 4.45 \,\mu {\rm g} \,(+121 \,\%)$  und  $\mathbf{P}_{\rm rad} = 158.2 \,{\rm kW} \,(+201 \,\%)$ .

Ein solches Phänomen existiert tatsächlich, sogenannte MARFEs (Massive Anisotropic Radiation From the Edge, [39]). Da der EMC3-Code aber nur stationäre Zustände behandeln kann und in diesem Fall keine Konvergenz der Ergebnisse erreicht wird, ist dies höchstens eine qualitative Beschreibung eines MARFEs.

# 5.3 Abschirmeffekt des DED

Ein Ziel des DED ist es, das Kernplasma vor Verunreinigungen abzuschirmen. Ob dies für das in dieser Arbeit untersuchte MHD-Gleichgewicht gelingt, wird nun untersucht, indem zum Vergleich Simulationen ohne DED und in einer anderen DED-Mode (6/2) durchgeführt werden. Für den DED-Strom  $I_{\text{DED}}$  wird dabei in der 6/2-Mode die Hälfte des Wertes für die 12/4-Mode angenommen. Aufgrund der unterschiedlichen Stromrichtungen in den DED-Spulen (s. Tab. 4.1 auf Seite 34) wird somit eine in etwa gleichwertige Störung erzeugt.

#### Verunreinigungsquelle

Durch den DED wird der radiale Transport in der Plasmarandschicht erhöht, was sich in einem erhöhten Teilchenfluss auf die Wand  $\Gamma_{\rm rec}$  äußert (s. Abb. 5.36 und Tab. 5.2).

Konfiguration	$\Gamma_{\rm rec}[{\rm kA}]$	$T_e^{(\text{Target})} [\text{eV}]$	$M_{\rm imp}  [\mu {\rm g}]$	$\mathbf{P}_{\mathrm{rad}}[\mathrm{kW}]$
ohne DED-Störfeld	1.54	27.6	7.14	27.0
12/4-Mode	2.34	19.0	3.36	24.2
6/2-Mode	3.07	14.7	2.27	28.3

Tabelle 5.2: Recyclingfluss  $\Gamma_{\rm rec}$ , mittlere Temperatur vor der DED-Oberfläche  $T_e^{({\rm Target})}$ , totaler Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  und Strahlungsverluste  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  für verschiedene Konfigurationen. Da das Simulationsgebiet für die 6/2-Mode aus Gründen der Symmetrie  $\Delta \varphi^{(6/2)} = 180^{\circ}$  abdeckt im Gegensatz zur 12/4-Mode mit  $\Delta \varphi^{(12/4)} = 90^{\circ}$  -, werden  $\Gamma_{\rm rec}$ ,  $M_{\rm imp}$  und  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  auf den vollen Torusumfang skaliert, um die Werte besser miteinander vergleichen zu können.

Mit höherem  $\Gamma_{\rm rec}$  in der 12/4- bzw. 6/2-Mode ist entsprechend auch  $\Gamma_{\rm imp}$ höher. Wie aber schon in den vorigen Abschnitten gezeigt wurde, ist  $M_{\rm imp}$ noch von anderen Faktoren abhängig. Deshalb bedeutet eine höheres  $\Gamma_{\rm imp}$ nicht automatisch auch ein höheres  $M_{\rm imp}$ .

### KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT



Abbildung 5.36: Recyclingfluss  $\Gamma_{\rm rec}$  und Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  in verschiedenen DED-Konfigurationen bei  $n_{\rm in} = 1.36 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$ , skaliert auf den vollen Torusumfang (s. Unterschrift zu Tab. 5.2).

#### Verunreinigungsgehalt

 $M_{\rm imp}$  ist in Abb. 5.36 für verschiedene DED-Konfigurationen aufgetragen. Die berechneten Werte sind gleichzeitig auch in Tab. 5.2 zu sehen. Es fällt auf, dass  $M_{\rm imp}$  in den Simulationen der 12/4- und 6/2- Mode deutlich reduziert (auf 47 % in der 12/4-Mode und auf 32 % in der 6/2-Mode) und nicht etwa durch höheres  $\Gamma_{\rm imp}$  erhöht ist.

Diese Reduzierung von  $M_{\rm imp}$  in Anwesenheit das DED-Störfelds kann durch die Erhöhung des radialen Transportes erklärt werden. Durch die höhere Strömung zur DED-Oberfläche hin ist auch die Reibung zwischen Verunreinigungen und Wasserstoffionen größer. Dadurch werden Verunreinigungen, die ins Plasma eindringen, abgebremst und schneller wieder zurück zur Wand befördert, wodurch ihre mittlere Eindringtiefe reduziert wird. Dieser Effekt wird gut in Abb. 5.37 deutlich, wo gemittelte radiale Profile der totalen Kohlenstoffdichte

$$n_{\rm imp} = \sum_{i=1}^{6} n_{\rm C^{i+}} \tag{5.15}$$

gezeigt sind.  $n_{\rm imp}$  sowie die effektive Ionenladung

γ

$$Z_{\rm eff} = \frac{1}{n_e} \sum_a Z_a^2 n_a$$

sind bei  $r_{\min} = 38.7 \,\mathrm{cm}$  in folgender Tabelle aufgelistet:

KONFIGURATION	$n_{\rm imp}  [10^{11}  {\rm cm}^{-3}]$	$Z_{\rm eff} - 1$
ohne DED-Störfeld	1.09	$9.7 \cdot 10^{-2}$
12/4-Mode	0.41	$3.7\cdot10^{-2}$
6/2-Mode	0.15	$1.2\cdot 10^{-2}$



Abbildung 5.37: Über ungestörte Flussflächen auf der Hochfeld-Seite gemittelte totale Kohlenstoffdichte  $n_{\rm imp}$  in verschiedenen DED-Konfigurationen.

Trotz geringerem  $M_{\rm imp}$  in Anwesenheit des DED-Störfeldes ist  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  nicht reduziert (s. Tab. 5.2). Das liegt daran, dass  $T_e$  in der Plasmarandschicht in den Simulationen mit DED-Störfeld reduziert ist, was in Tab. 5.2 anhand  $T_e^{({\rm Target})}$  gezeigt ist. Dies führt, wie schon in vorangegangenen Abschnitten beschrieben, zu einer stärkeren Besetzung der unteren Ladungszustände (s. Abb. 5.38). Während der Anteil der C<sup>1+</sup>- bis C<sup>3+</sup>-Ionen ohne DED-Störfeld bei  $c_{123}^{(no DED)} = 0.11$  liegt, ist deren Anteil in der 12/4- und 6/2-Mode viel höher: bei  $c_{123}^{(12/4)} = 0.29$  bzw.  $c_{123}^{(6/2)} = 0.47$ . Der Anteil der oberen Ladungszustände C<sup>4+</sup> bis C<sup>6+</sup> verhält sich entsprechend umgekehrt. Die stärkere Besetzung der unteren Ladungszustände, die stärker strahlen, führt dazu, dass die totalen Strahlungsverluste für die 12/4-Mode mit  $\mathbf{P}_{\rm rad} = 24.2$  kW nur schwach gegenüber dem ungestörten Fall mit  $\mathbf{P}_{\rm rad} = 27.0$  kW abnehmen. In der 6/2-Mode nehmen die Strahlungsverluste mit  $\mathbf{P}_{\rm rad} = 28.3$  kW sogar leicht zu.

Auch bei höheren Dichten  $(n_{\rm in} = 2.0 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3} \,\mathrm{und} \,n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3})$ ist ein Abschirmeffekt durch das DED-Störfeld zu erkennen, der sogar noch



Abbildung 5.38: Besetzung der Ladungszustände von Kohlenstoff  $c_Z$  in verschiedenen DED-Konfigurationen.

größer ausfällt als bei $n_{\rm in}=1.36\cdot10^{13}\,{\rm cm}^{-3}$  (s. Abb. 5.39):  $M_{\rm imp}$  beträgt in der 12/4-Mode nur 26 % von  $M_{\rm imp}$  ohne DED-Störfeld.

	ohne DED		12/4	
$n_{\rm in}  [10^{13}  {\rm cm}^{-3}]$	$\Gamma_{\rm imp}\left[A\right]$	$M_{\rm imp} \left[ \mu {\rm g} \right]$	$\Gamma_{\rm imp}\left[A\right]$	$M_{\rm imp} \left[ \mu {\rm g} \right]$
1.36	35.9	7.1	49.9	3.36
2.72	78.5	14.9	102.2	3.86

Die beobachtete Abschirmung des Kernplasmas vor Verunreinigungen ist genau der Effekt, der mit dem DED erzielt werden soll! Allerdings wurde im Experiment bislang noch keine Reduzierung von  $M_{\rm imp}$  entdeckt.

# 5.4 Ladungsaustausch

In diesem Abschnitt wird der Einfluss von Ladungsaustausch zwischen neutralem Wasserstoff und Verunreinigungsionen (Kohlenstoffionen) untersucht.

$$H + C^{i+} \to H^+ + C^{(i-1)+}$$

Für Verunreinigungsionen ist dies effektiv eine Rekombination und für neutralen Wasserstoff eine Ionisation. Unter der Annahme kleiner Verunreinigungsdichten kann diese zusätzliche Quelle für H<sup>+</sup>-Ionen  $\Gamma_{cx,H^+}$  gegenüber



Abbildung 5.39: Verunreinigungsquelle  $\Gamma_{imp}$  (durchgezogene Linie) und gehalt  $M_{imp}$  (unterbrochene Linie) für verschiedene Dichten  $n_{in}$ : ohne DED-Störfeld (grün) und in der 12/4-Mode (blau).

der für normale Ionisation  $\Gamma_{ion,H^+}$  vernachlässigt werden, was in den Simulationen auch geschehen ist. Mit

$$\frac{\Gamma_{\rm cx,H^+}}{\Gamma_{\rm ion,H^+}} \approx 2 \cdot 10^{-3}$$

ist das für den hier betrachteten Fall eine gute Näherung. Ladungsaustauschraten  $R_Z^{(cx)}$  enthalten statt der Elektronendichte  $n_e$  die neutrale Wasserstoffdichte  $n_{\rm H}$ , welche beide in Abb. 5.40 für  $n_{\rm in} = 1.36 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$  zu sehen sind.

H entsteht an der DED-Oberfläche, wenn H<sup>+</sup>-Ionen dort auftreffen und mit einem Elektron rekombinieren. Gut zu erkennen ist die Streifenstruktur vor der DED-Oberfläche, die durch die dort lokalisierten Teilchenflüsse entsteht, wie ein Vergleich mit  $\Gamma_{\text{DED}}$  in Abb. 5.1 auf Seite 51 oben rechts zeigt. Auch auf den Seitenflächen rekombinieren H<sup>+</sup>-Ionen und lassen die beiden seitlichen Regionen mit neutralem H entstehen.

Insgesamt ist  $n_{\rm H}$  deutlich geringer als  $n_{\rm H^+}$  (man beachte die angepassten Farbskalen in Abb. 5.40). Die höchsten Werte für  $n_{\rm H}$  sind vor und seitlich der DED-Oberfläche zu finden und betragen etwa  $n_{\rm H,max} \approx 2.0 \cdot 10^{11} \,{\rm cm}^{-3}$ . Mit  $n_e \approx 6 - 8 \cdot 10^{12} \,{\rm cm}^{-3}$  ist  $n_e$  selbst dort noch um den Faktor 30 - 40

# KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT



Abbildung 5.40: Elektronendichte  $n_e$  (links) und Dichte von neutralem Wasserstoff  $n_{\rm H}$  (rechts). Die Maximalwerte auf den Skalen (rot) betragen  $n_e^{(\max)} = 1.4 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$  und  $n_{\rm H,max} = 2.0 \cdot 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$ .

größer<sup>5</sup>. Daher ist zu erwarten, dass ein Effekt hauptsächlich in der Nähe der DED-Oberfläche zu beobachten ist. Da  $R_Z^{(cx)}$  für C<sup>1+</sup> und C<sup>2+</sup> stark abnimmt bei niedrigem  $T_e$ , ist für C<sup>3+</sup> und C<sup>4+</sup> der größte Effekt zu erwarten. Um dies genauer zu untersuchen sind  $R_Z^{(ion)}$  in Abb. 5.41,  $R_Z^{(rec)}$  in Abb. 5.42 und  $R_Z^{(cx)}$  in Abb. 5.43 gezeigt. Aufgrund der sehr unterschiedlichen Größenordnungen wurde eine logarithmische Farbskala verwendet. In Abb. 5.44 und Abb. 5.45 sind dann die Kohlenstoffdichten  $n_Z^{CR+cx}$  (jeweils links) und die Dichtedifferenzen

$$\Delta n_Z = n_Z^{\rm CR+cx} - n_Z^{\rm CR}$$

zu einer Simulation ohne Ladungsaustausch (jeweils rechts) zu sehen. Hier wurde eine normale Farbskala verwendet, die allerdings für  $C^{6+}$  um den Faktor 10 gestreckt wurde.

 $R_{\rm C^{1+}}^{\rm (cx)}$  ist etwa so groß wie  $R_{\rm C^{1+}}^{\rm (rec)}$ , allerdings liegen beide 5-6 Größenordnungen unterhalb von  $R_{\rm C^{0+}}^{\rm (ion)}$  (vgl. Abb. 5.43, Abb. 5.42 und Abb. 5.41 jeweils oben links). Auf den Übergang C  $\leftrightarrow$  C<sup>1+</sup> hat Ladungsaustausch somit keinen Einfluss.  $R_{\rm C^{2+}}^{\rm (cx)}$  ist vor der DED-Oberfläche schon um etwa eine Größenordnung größer als  $R_{\rm C^{2+}}^{\rm (rec)}$  (vgl. Abb. 5.43 und Abb. 5.42 jeweils oben rechts), aber immer noch deutlich kleiner (etwa 4 Größenordnungen) als  $R_{\rm C^{1+}}^{\rm (ion)}$ , wie ein Vergleich mit Abb. 5.41 oben rechts zeigt. Auch für diesen Übergang spielt Ladungsaustausch hier keine Rolle,  $n_{\rm C^{1+}}$  bleibt im Wesentlichen unverändert (s. Abb. 5.44 oben).  $R_{\rm C^{3+}}^{\rm (cx)}$  ist schon deutlich größer als  $R_{\rm C^{3+}}^{\rm (rec)}$ , um

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Unmittelbar vor der DED-Oberfläche befinden sich auch H<sub>2</sub>-Moleküle. Deren Dichte  $n_{\rm H_2}$  ist etwa eine Größenordnung größer als  $n_{\rm H}$ , so dass insgesamt  $n_{\rm H} + 2 n_{\rm H_2} \sim n_e$  gilt, was im stationären Zustand  $\Gamma_{\rm in} = \Gamma_{\rm out}$  bei vergleichbaren Geschwindigkeiten der ein- und auslaufenden Teilchen auch zu erwarten ist.



Abbildung 5.41:  $R_Z^{(\text{ion})}$  für C<sup>0+</sup> (oben links) bis C<sup>5+</sup> unten rechts in logarithmischer Form. Der Wertebereich läuft von  $10^9 \,\mathrm{cm}^{-3} \,\mathrm{s}^{-1}$  (weiß) bis  $10^{16} \,\mathrm{cm}^{-3} \,\mathrm{s}^{-1}$  (rot).

etwa 2 Größenordnungen (vgl. Abb. 5.43 und Abb. 5.42 Mitte links). Vor der DED-Oberfläche gibt es Streifen, in denen  $R_{C^{3+}}^{(cx)}$  sogar bis auf etwa eine Größenordnung unter  $R_{C^{2+}}^{(ion)}$  ansteigt, wie ein Vergleich mit Abb. 5.41 Mitte links zeigt. Hier ist ein kleiner Effekt von Ladungsaustausch zu erkennen:  $\Delta n_{C^{2+}} \approx 2 - 3 \cdot 10^9 \,\mathrm{cm}^{-3}$ , was etwa 2 - 3% von  $n_{C^{2+}}^{CR+cx}$  ausmacht. Ein viel größerer Effekt ist aber bei C<sup>3+</sup> und C<sup>4+</sup> zu bemerken.  $R_{C^{4+}}^{(cx)}$  liegt um etwa 2-3 Größenordnungen über  $R_{C^{4+}}^{(rec)}$  (vgl. Abb. 5.42 und Abb. 5.43 Mitte



# KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.42:  $R_Z^{(\text{rec})}$  für C<sup>1+</sup> (oben links) bis C<sup>6+</sup> (unten rechts) in logarithmischer Form. Der Wertebereich läuft von  $10^9 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  (weiß) bis  $10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  (rot).

rechts) und ist vergleichbar, aber immer noch geringer als  $R_{\rm C^{3+}}^{\rm (ion)}$ , wie es in Abb. 5.41 Mitte rechts zu sehen ist. Dies führt vor der DED-Oberfläche zu einer Erhöhung von  $\Delta n_{\rm C^{3+}}\approx 0.8\cdot 10^{10}\,{\rm cm^{-3}}$  und gleichzeitig einer Verringerung von  $\Delta n_{\rm C^{4+}}\approx -\Delta n_{\rm C^{3+}}$  (vgl. Abb. 5.44 unten rechts und Abb. 5.45 oben rechts), was etwa 10 % von  $n_{\rm C^{3+}}^{\rm CR+cx}$  ausmacht.

Beim Übergang  $C^{4+} \leftrightarrow C^{5+}$  fällt auf, dass der größte Effekt im inneren Bereich auf der Niederfeld-Seite auftritt (vgl. Abb. 5.45 oben rechts und



Abbildung 5.43:  $R_Z^{(cx)}$  für C<sup>1+</sup> (oben links) bis C<sup>6+</sup> (unten rechts) in logarithmischer Form. Der Wertebereich läuft von  $10^9 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  (weiß) bis  $10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  (rot).

Mitte rechts). Dort ist  $n_{\rm C^{5+}}$  am größten, so dass auch dort die größte absolute Änderung von  $\Delta n_{\rm C^{5+}}\approx -0.3\cdot 10^{10}\,{\rm cm^{-3}}\approx -\Delta n_{\rm C^{4+}}$ zu sehen ist, was etwa 6 % von  $n_{\rm C^{4+}}^{\rm CR+cx}$ ausmacht.

Auch der Anteil an C<sup>6+</sup> ist aufgrund von Ladungsaustausch reduziert. Wegen der sehr kleinen Dichten ist dies in den Differenzplots Abb. 5.45 aber schlecht zu erkennen. Dies ist besser in Abb. 5.46 zu sehen, wo  $M_Z$  und  $P_{\text{rad},Z}$  für alle Ladungszustände gezeigt ist. Die Unterschiede sind noch einmal in



KAPITEL 5. PARAMETERSTUDIEN ZUM VERUNREINIGUNGSTRANSPORT

Abbildung 5.44:  $n_Z^{\text{CR+cx}}$  (links) und  $\Delta n_Z$  (rechts) für C<sup>1+</sup> (oben), C<sup>2+</sup> (mitte) und C<sup>3+</sup> (unten).

Ionensorte	$\Delta M_Z \left[ 10^{-3}  \mu \mathrm{g} \right]$		$\Delta P_{\mathrm{rad},Z} \left[ \mathbf{W} \right]$	
$C^{1+}$	-0.6	(-1%)	-4	(-1%)
$C^{2+}$	+0.6	(+1%)	+40	(+2%)
$C^{3+}$	+13.9	(+12%)	+544	(+18%)
$C^{4+}$	+12.0	(+2%)	+55	(+21%)
$C^{5+}$	-16.3	(-34%)	+3	(+21%)
$C^{6+}$	-0.3	(-32%)	+0.1	(+118%)

Folgender Tabelle aufgelistet:



Abbildung 5.45:  $n_Z^{\text{CR+cx}}$  (links) und  $\Delta n_Z$  (rechts) für C<sup>4+</sup> (oben), C<sup>5+</sup> (mitte) und C<sup>6+</sup> (unten).

Die relative Änderung von  $M_{C^{4+}}$  fällt vergleichsweise klein aus, es gibt hauptsächlich eine Umverteilung im Aufenthaltsort der C<sup>4+</sup>-Ionen. Weiterhin fällt auf, dass  $P_{\rm rad,C^{4+}}$ ,  $P_{\rm rad,C^{5+}}$  und  $P_{\rm rad,C^{6+}}$  höher ausfallen mit Ladungsaustausch, obwohl  $M_{C^{4+}}$  etwa gleich bleibt und  $M_{C^{5+}}$  sowie  $M_{C^{6+}}$ reduziert sind. Ursache dafür ist die in Folge von Ladungsaustausch ausgelöste Linienstrahlung, die nicht in  $\mathcal{P}_Z^{(\rm line, CR)}$  enthalten ist, sondern in einem zusätzlichen Strahlungskoeffizienten  $\mathcal{P}_Z^{(\rm cx, CR)}$  berücksichtigt wird (s. Kapitel 2.3.1 auf Seite 9).



Abbildung 5.46: Totaler Gehalt (durchgezogene Linie)  $M_Z$  und zugehörige Strahlungsverluste  $P_{\text{rad},Z}$  (unterbrochene Linie) mit und ohne Ladungsaustausch.

Insgesamt bleibt  $M_{\rm imp}$  in etwa erhalten (+1%),  $\mathbf{P}_{\rm rad}^{\rm (CR)} = 6.11 \,\mathrm{kW}$  erhöht sich hingegen um etwa 9% auf  $\mathbf{P}_{\rm rad}^{\rm (CR+cx)} = 6.68 \,\mathrm{kW}$ . Dies ist aber primär auf der Verschiebung im Ionisationsgleichgewicht und nicht auf den zusätzlichen Strahlungskoeffizienten  $\mathcal{P}_Z^{\rm (cx, CR)}$  zurückzuführen.

In einer weiteren Simulation wurde Ladungsaustausch bei höheren Dichten untersucht ( $n_{\rm in} = 2.72 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$ ). Bei höherem  $n_{\rm in}$  ist auch  $\Gamma_{\rm rec}$  höher (s. Abschnitt 5.2.1), weshalb auch mehr neutraler Wasserstoff entsteht.  $n_{\rm H}$  beträgt vor der DED-Oberfläche bis zu  $n_{\rm H,max} \approx 6 \cdot 10^{11} \,{\rm cm}^{-3}$ , fällt dann aber in radialer Richtung stärker ab als bei niedrigem  $n_{\rm in}$ . Die mittlere Eindringtiefe beträgt etwa  $\lambda_n \sim 4 \,{\rm cm}$  im Vergleich zu  $\lambda_n \sim 6 - 7 \,{\rm cm}$  (vgl. Abb. 5.40). Die wird durch die höhere Ionisationsrate von H bei stark anwachsendem  $n_e$  vor der DED-Oberfläche verursacht.

Es erscheinen jedoch keine prinzipiell neuen Phänomene, so dass die genauen Ergebnisse der Simulation bei  $n_{\rm in} = 2.27 \cdot 10^{13} \,{\rm cm}^{-3}$  hier nicht weiter diskutiert werden. Im Endeffekt bleibt  $M_{\rm imp}$  wieder in etwa gleich (+1%), wobei  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  durch die Umverteilung der Ladungszustände zunimmt (+10%).

# Kapitel 6

# Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden Simulationen der Plasmarandschicht von TEXTOR-DED in der Approximation eines schwach verunreinigten Plasmas mit dem Codepaket EMC3-EIRENE durchgeführt. Das Magnetfeld wurde dabei nach Biot-Savart anhand der realen Spulenkoordinaten bestimmt (s. Kapitel 4.3) im Gegensatz zu vielen anderen Arbeiten, die z.B. ein approximierendes Mapping-Verfahren einsetzen.

Es wurde gezeigt, dass das lokale Ionisationsgleichgewicht von Kohlenstoff wesentlich durch Transportprozesse beeinflusst ist (s. Kapitel 5.1.3). Durch einen ständigen Nachschub von neutralem Kohlenstoff entsteht eine Verschiebung zu niedrigen Ladungszuständen hin.

In verschiedenen Parameterstudien wurde in Kapitel 5.2 durch Variation von  $n_{\rm in}$ ,  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  und  $D_{\perp}$  gezeigt, dass der Verunreinigungsgehalt  $M_{\rm imp}$  keine einfache Funktion der Verunreinigungsquelle  $\Gamma_{\rm imp}$  ist, sondern entscheidend durch das lokale Ionisationsgleichgewicht beeinflusst wird. Bei Verdopplung der Dichte  $n_{\rm in}$  (s. Kapitel 5.2.1) steigt z.B.  $\Gamma_{\rm imp}$  in etwa gleichem Maße an (+103%),  $M_{\rm imp}$  nimmt dabei jedoch nur schwach zu (+15%), was tendenziell im Experiment auch so beobachtet wird. Gleichzeitig findet eine Abkühlung der Plasmarandschicht statt, die zu einer Verschiebung im Ionisationsgleichgewicht zu niedrigen Ladungszuständen führt. Da Thermokräfte stärker auf Ionen höherer Ladung wirken (s. Kapitel 5.1.5) befinden sich diese Ionen konzentriert vor der DED-Oberfläche. Dadurch ist deren Einschlusszeit geringer, weshalb mit der Verschiebung im Ionisationsgleichgewicht tendenziell eine Verringerung von  $M_{\rm imp}$  bei gleicher Quelle  $\Gamma_{\rm imp}$ verbunden ist.

Desweiteren wurde festgestellt, dass das Ionisationsgleichgewicht einen erheblichen Einfluss auf die abgestrahlte Leistung  $\mathbf{P}_{rad}$  besitzt. Die unteren Ladungszustände von Kohlenstoff strahlen viel stärker als die oberen, wes-

halb bei abnehmendem  $T_e$  - und einer damit verbundenen Verschiebung im Ionisationsgleichgewicht - eine Erhöhung der Strahlungsverluste verbunden ist (+229%, bei Verdopplung von  $n_{in}$ , s.o.).

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Korona-Modell für Ratenkoeffizienten im EMC3-Code, welches ursprünglich aus dem STRAHL-Code [2] stammt, um das Stoß-Strahlungs-Modell der ADAS-Datenbank [1] ergänzt (s. Kapitel 2.3.1). Die Berücksichtigung des vollen Stoß-Strahlungs-Gleichgewichts bewirkt, dass sich lokal ein anderes Ionisationsgleichgewicht einstellt.  $T_e$  in der Plasmarandschicht ist dafür ein empfindlicher Parameter, welcher allerdings nicht direkt über einen Inputparameter des EMC3-Codes gesteuert werden kann. Indirekt kann die Temperatur-Verteilung über die Inputparameter  $n_{\rm in}, D_{\perp}$  und  $\mathbf{P}_{\rm heat}$  gesteuert werden, wie in Kapitel 5.2 untersucht wurde. Bei einer Erhöhung von  $n_{\rm in}$  und  $D_{\perp}$  wurde eine Abnahme und bei Erhöhung von  $\mathbf{P}_{heat}$  eine Zunahme der Temperatur beobachtet. Bei hohem  $n_{\rm in}$  entstehen die größten Unterschiede zwischen Korona- und CR-Modell: eine Überschätzung von 6 % bei $M_{\rm imp}$  und 88 % bei ${\bf P}_{\rm rad}$ im Korona-Modell des STRAHL-Codes (s. Kapitel 5.2.1). Bei zusätzlicher Erhöhung von  $D_{\perp}$ (s. Kapitel 5.2.3) wird  $\mathbf{P}_{rad}$  im Korona-Modell so groß, dass die numerischen Berechnungen instabil werden. Die über mehrere Iterationsschritte gemittelten Werte für  $M_{\rm imp}$  bzw.  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  werden im Korona-Modell um 120 % bzw. 200% überschätzt. Bei hoher Dichte und niedriger Temperatur können somit durch die Wahl des Modells für atomare Prozesse signifikante Unterschiede in den Berechnungen entstehen. Dies ist besonders in Simulationen zum Island Divertor in W7-AS und W7-X relevant, für die der EMC3-Code entwickelt wurde [13, 10].

Durch die Kopplung des EMC3-Codes an die ADAS-Datenbank ist es nun möglich, die Verteilungen spezifischer Linienstrahlung zu berechnen. Dadurch werden Vergleiche mit dem Experiment ermöglicht, in dem z.B. die Verteilung der Linie  $\lambda = 465.0$  nm von C<sup>2+</sup> gemessen wird. Erste Vergleiche (s. Kapitel 5.1.8) haben Abweichungen in der Strahlungsverteilung vor der DED-Oberfläche gezeigt, die in Zukunft eine genauere Untersuchung erfordern.

Vergleichsrechnungen ohne DED-Störfeld (s. Kapitel 5.3) haben belegt, dass durch das Störfeld in der 12/4-Mode ein Abschirmeffekt entsteht, bei dem  $M_{\rm imp}$  auf bis zu 26 % reduziert ist. Diese Abschirmung wird auch bei Simulationen einer anderen DED-Mode (6/2) bestätigt. Im Experiment wurde dieses Verhalten jedoch bislang nicht beobachtet, was vermutlich an der Einfachheit des verwendeten Plasma- (s. Kapitel 3.2) und Sputter-Modells (s. Kapitel 5.1.1) liegt.  $\Gamma_{\rm imp}$  wird im vereinfachten Sputter-Modell des EMC3-Codes (konstanter Anteil des Teilchenflusses auf die Wand) gegenüber dem physikalisch sinnvollerem Modell des EIRENE-Codes (Bohdansky Formel für physikalisches Sputtern (Gl. (5.2)) und Thompson-Verteilung (Gl. (5.4))
für die Energie der gesputterten Teilchen) um den Faktor 10 überschätzt. Auch wird z.Zt. kein Selbst-Sputtern berücksichtigt, das erheblichen Einfluss auf die Sputterausbeute haben kann [39]. Für ein zukünftiges Projekt ist geplant, die Berechnung der Flüsse der Verunreinigungsionen auf die Wand in den EMC3-Code zu implementieren, welche dann anschließend dem EIRENE-Code als Input übergeben werden.

Die Implementation der ADAS-Datenbank in den EMC3-Code ermöglicht es außerdem, einen weiteren physikalischen Effekt zu berücksichtigen. Ladungsaustausch zwischen Verunreinigungsionen und neutralem Wasserstoff führt zu einer Änderung im Ionisationsgleichgewicht (s. Kapitel 5.4).  $M_{\rm imp}$ verändert sich dabei jedoch kaum (+1%), lediglich  $\mathbf{P}_{\rm rad}$  ist erhöht (+10%).

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass diese Arbeit die Anwendbarkeit des EMC3-Codes auf ein schwach verunreinigtes Plasma in TEXTOR-DED gezeigt und damit erste Vergleiche mit dem Experiment ermöglicht hat. Für genauere Vergleiche mit dem Experiment muss aber das vereinfachte Verunreinigungsmodell im EMC3-Code in einem zukünftigen Projekt erweitert werden.

## Anhang A

# Symbolverzeichnis

$n_e$	:	Elektronendichte
$n_i$	:	Wasserstoffionendichte
$n_a$	:	allgemein Dichte der Teilchensorte a
$\underline{u}_a$	:	Mittlere Geschwindigkeit der Teilchensorte a
$T_e$	:	Elektronentemperatur
$T_i$	:	Ionentemperatur
$p_a = n_a T_a$	:	Druck der Teilchensorte a
$S_{a}^{(p)}, S_{a}^{(m)}, S_{a}^{(e)}$	:	Quellterme in der Teilchen-, Impuls- und Energiebilanz
$D_{\perp}$	:	senkrechter Teilchen-Transportkoeffizient
$\chi_{\perp}$	:	senkrechter Energie-Transportkoeffizient
$n_{ m in}$	:	Dichte auf der inneren Simulationsbegrenzung
$\mathcal{R}_{Z}^{(\mathrm{ion})}, R_{Z+Z+1}^{(\mathrm{ion})}$	:	Ratenkoeffizient und Rate für Ionisation aus dem Ladungs-
$Z \rightarrow Z+1$		zustand $Z$
$\mathcal{R}_{Z}^{(\mathrm{rec})}, R_{Z}^{(\mathrm{rec})}$	:	Ratenkoeffizient und Rate für Rekombination aus dem La-
$\Sigma \rightarrow \Sigma \rightarrow \Sigma - 1$		dungszustand $Z$
$\mathcal{P}_Z^{(\mathrm{rad})},  P_{\mathrm{rad},Z}$	:	Ratenkoeffizient und Rate für abgestrahlge Energie des La-
2 ,		dungszustandes $Z$
$\Gamma_{\rm rec},  \Gamma_{\rm imp}$	:	Recyclingfluss und Verunreinigungsquelle
$M_{\rm imp}$	:	totaler Verunreinigungsgehalt
$C_{\mathrm{sput}}$	:	Sputterkoeffizient
$\mathbf{P}_{\mathrm{cool}}$	:	Kühlung der Elektronen (durch Strahlung und Ionisation
		von Verunreinigungen)
$\mathbf{P}_{ ext{heat}}$	:	Heizleistung (Energiefluss durch die innere Simulationsbe-
		grenzung)
$\mathbf{P}_{ ext{ion}}$	:	Energieverluste durch Ionisation von Verunreinigungen
$\mathbf{P}_{\mathrm{rad}}$	:	Energieverluste durch Strahlung von Verunreinigungen
$Z_{ m eff}$	:	effektive Ionenladung

### Anhang B

### Coulomb-Stöße

Für Coulomb-Stöße kann gezeigt werden, dass Stöße mit kleinem Streuwinkel den dominanten Beitrag liefern. Viele simultane Stöße mit kleinem Streuwinkel haben gemittelt denselben Effekt wie eine Reihe unabhängiger binärer Stöße. In diesem Fall kann  $C_{ab}^{(C)}$  durch das Boltzmann Stoßintegral

$$C_{ab}^{(C)} = \iint d\Omega \, d^3 v_b \left( f'_a \, f'_b - f_a \, f_b \right) \, g \, \sigma_{ab} \left( g, \chi \right) \tag{B.1}$$

angegeben werden, welches binäre Stöße zwischen Gasteilchen beschreibt.  $f_i \equiv f_i(\underline{v}_i, \underline{r}, t)$  und  $f'_i \equiv f_i(\underline{v}'_i, \underline{r}, t)$  sind die Verteilungsfunktionen vor und nach dem Stoß,  $g \equiv |\underline{v}_b - \underline{v}_a|$  die Relativgeschwindigkeit und  $\sigma_{ab}(g, \chi)$  der differentielle Wirkungsquerschnitt (abhängig vom Winkel  $\chi$ ).

Zur Berechnung des Impuls- und Energieaustauschs zwischen Teilchensorte a und b aus Gl. (B.1) nehmen wir im Folgenden Maxwellverteilungen

$$f_i = n_i \left(\frac{\gamma_i}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{\gamma_i}{2} \left(\underline{v}_i - \underline{u}_i\right)^2\right]$$
(B.2)

mit einer Driftgeschwindigkeit  $\underline{u}_a$  bzw.  $\underline{u}_b$  an.  $\gamma_i$  ist das Verhältnis aus Masse zur Temperatur eines Teilchens

$$\gamma_i \equiv \frac{m_i}{T_i}.\tag{B.3}$$

Die folgende Herleitung des Impuls- und Energieübertrags ist eine ausführliche Version des in [42] skizzierten Verfahrens.

### B.1 Umformung des Boltzmann Stoßintegrals

Impuls- und Energieübertrag haben die Form

$$\Psi_{a}^{(i)} \equiv \int d^{3}v_{a} \ \psi_{a} \ C_{ab}^{(C)}$$
  
$$= \iiint d\Omega \ d^{3}v_{a} \ d^{3}v_{b} \ \psi_{a} \ \left(f_{a}' \ f_{b}' - f_{a} \ f_{b}\right) \ g \ \sigma_{ab} \ (g, \chi)$$
(B.4)

mit  $\psi_a^{(1)} = m_a \underline{v}_a$  bzw.  $\psi_a^{(2)} = \frac{1}{2} m_a v_a^2$ . Dies läßt sich unter Ausnutzung der Symmetrierelation beim elastischen Stoß

$$g\,\sigma_{ab}\left(g,\chi\right)\,d\Omega\,d^{3}\!v_{a}\,d^{3}\!v_{b}\,=\,g'\,\sigma_{ab}'\left(g',\chi\right)\,d\Omega\,d^{3}\!v_{a}'\,d^{3}\!v_{b}'$$

leicht zu

$$\Psi_{a}^{(i)} = \iiint d\Omega \, d^{3}v_{a} \, d^{3}v_{b} \left(\psi_{a}^{\prime} - \psi_{a}\right) \, f_{a} \, f_{b} \, g \, \sigma_{ab} \left(g, \chi\right) \tag{B.5}$$

umformen, wenn man im ersten Term von Gl. (B.4) die gestrichenen und ungestrichenen Größen ineinander umbenennt. Nun wird neben der Relativgeschwindigkeit g die Paar-Schwerpunktsgeschwindigkeit

$$\underline{G} \equiv \frac{m_a \, \underline{v_a} + m_b \, \underline{v_b}}{m_a + m_b} \tag{B.6}$$

eingeführt, die vor und nach dem Stoß konstant bleibt (Impulserhaltung). Damit lassen sich die Teilchengeschwindigkeiten in einen Schwerpunkt- und Relativanteil aufteilen:

$$m_a \underline{v}_a = m_a \underline{G} - \mu_{ab} g \tag{B.7}$$

$$m_b \underline{v}_b = m_b \underline{G} + \mu_{ab} g, \tag{B.8}$$

wobe<br/>i $\mu_{ab} = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}$ reduzierte Masse ist. Damit gilt

$$\psi_a^{(1)'} - \psi_a^{(1)} = -\mu_{ab} \left(\underline{g}' - \underline{g}\right) \tag{B.9}$$

$$\psi_a^{(2)'} - \psi_a^{(2)} = -\mu_{ab} \underline{G} \cdot (\underline{g}' - \underline{g}).$$
(B.10)

Da der Betrag der Relativgeschwindigkeit g beim elastischen Stoß erhalten bleibt (Energieerhaltung), kann nun die Winkelintegration in Gl. (B.5) in kompakter Form als effektiver Wirkungsquerschnitt  $\mathfrak{Q}_{ab}(g)$  geschrieben werden.

#### B.2 Effektiver Wirkungsquerschnitt

Mit den Relativgeschwindigkeiten vor und nach dem Stoß

$$\underline{g} = g \underline{e}_{g}$$

$$\underline{g}' = g \cos \chi \underline{e}_{g} + g \sin \chi \cos \varphi \underline{e}_{g_{\perp_{1}}} + g \sin \chi \sin \varphi \underline{e}_{g_{\perp_{2}}}$$
(B.11)

und Gl. (B.9) bzw. Gl. (B.9) wird die Winkelintegration in Gl. (B.5) zu

$$\int d\Omega \left(\underline{g}' - \underline{g}\right) \sigma_{ab}\left(g, \chi\right) = -\underline{g} \underbrace{\int d\Omega \left(1 - \cos\chi\right) \sigma_{ab}\left(g, \chi\right)}_{\equiv \mathfrak{Q}_{ab}(g)}, \qquad (B.12)$$

wodurch der effektive Wirkungsquerschnitt  $\mathfrak{Q}_{ab}(g)$  bestimmt ist.  $f_a, f_b$  und ghängen nicht vom Winkel  $\chi$  ab und können daher vor das Integral über den Winkel gezogen werden. Für ein Coulombpotential, das bei der Debyelänge  $r_D$  abgeschnitten wird ( $\Theta$  ist die Heaviside-Funktion)

$$U_{ab}(r) = \frac{q_a q_b}{r} \Theta (r_D - r), \qquad r_D^{-2} = 4\pi \sum_a \frac{n_a q_a^2}{T_a}$$
(B.13)

ergibt sich für den effektiven Wirkungsquerschnitt [42]

$$\mathfrak{Q}_{ab}(g) = \frac{4\pi \, q_a^2 \, q_b^2}{\mu_{ab}^2 \, g^4} \ln \Lambda \tag{B.14}$$

mit Coulomblogarithmus  $\ln\Lambda.$  Dies gilt allerdings nur für  $\ln\Lambda\gg1.$  Ein abgeschirmtes Coulomb<br/>potential

$$U_{ab}(r) = \frac{q_a \, q_b}{r} \, e^{-r/r_D} \tag{B.15}$$

liefert dasselbe Ergebnis wie Gl. (B.14), wenn man ln A durch ln A + ln 2 -  $\frac{1}{2} - \gamma$  mit der Euler Konstanten  $\gamma = 0.5772$  ersetzt. Für ln A  $\gg 1$  ist offensichtlich, dass dieser Korrekturterm vernachlässigbar ist. Bei Plasmadichten

von  $n \approx 10^{13} \,\mathrm{cm}^{-3}$  und Temperaturen von  $T \approx 100 \,\mathrm{eV}$  gilt  $\ln \Lambda \approx 15$ . Dieser konstante Wert wird auch im EMC3 für  $\ln \Lambda$  verwendet.

#### B.3 Impulsaustausch

Der Impulsaustausch kann nun aus Gl. (B.5) mit Gl. (B.9) und dem effektiven Wirkungsquerschnitt aus Gl. (B.14) berechnet werden:

$$\underline{R}_{ab} = \mu_{ab} \iint d^3 v_a \, d^3 v_b \, \underline{g} \, g \, f_a \, f_b \, \mathfrak{Q}_{ab}(g). \tag{B.16}$$

Dazu betrachten wir die Geschwindigkeit des Plasmas als Ganzes

$$\underline{u} = \frac{\sum_{a} n_{a} m_{a} \underline{u}_{a}}{\sum_{a} n_{a} m_{a}} \tag{B.17}$$

und definieren die Eigengeschwindigkeit  $\underline{c}_a$  und relative Driftgeschwindigkeit  $\underline{w}_a$  der Spezies *a* relativ zu  $\underline{u}$ :

$$\underline{c_a} = \underline{v_a} - \underline{u} \tag{B.18}$$

$$\underline{w_a} = \underline{u_a} - \underline{u}. \tag{B.19}$$

Damit läßt sich nun der Exponentialterm in der Maxwellverteilung auf folgende Weise umformen:

$$\exp\left[-\frac{\gamma_i}{2} \left(\underline{v}_i - \underline{u}_i\right)^2\right] = \exp\left[-\frac{\gamma_i}{2} \left(\underline{c}_i - \underline{w}_i\right)^2\right]$$
(B.20)  
$$= \exp\left[-\frac{\gamma_i}{2} c_i^2\right] \exp\left[\gamma_i \underline{c}_i \cdot \underline{w}_i - \frac{\gamma_i}{2} w_i^2\right]$$
(B.21)

Ist die Abweichung der mittleren Geschwindigkeit  $\underline{u}_a$  von der Plasmageschwindigkeit  $\underline{u}$  im Verhältnis zur thermischen Geschwindigkeit klein, so gilt  $\gamma_i^{1/2} w_i \ll 1$  und der zweite Faktor kann nach dieser kleinen Größe entwickelt werden. In erster Ordnung gilt dann für das Produkt

$$f_a f_b \approx n_a n_b f_{\gamma_a}^{(0)}(c_a) f_{\gamma_b}^{(0)}(c_b) \left(1 + \gamma_a \underline{c}_a \cdot \underline{w}_a + \gamma_b \underline{c}_b \cdot \underline{w}_b\right) \qquad (B.22)$$

 $\operatorname{mit}$ 

$$f_x^{(0)}(v) = \left(\frac{x}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{x}{2}v^2\right].$$
 (B.23)

An dieser Stelle ist es jetzt sinnvoll, die Terme  $A_1 \equiv \gamma_a c_a^2 + \gamma_b c_b^2$  und  $A_2 \equiv \gamma_a \underline{c}_a \cdot \underline{w}_a + \gamma_b \underline{c}_b \cdot \underline{w}_b$  umzuformen und durch  $\underline{X}$  und  $\underline{g}$  auszudrücken, wobei  $\underline{X}$  durch

$$\underline{X} \equiv \frac{\gamma_a \underline{c}_a + \gamma_b \underline{c}_b}{\gamma_a + \gamma_b} \tag{B.24}$$

definiert ist. Dies ist wegen

$$d^{3}X d^{3}g = d^{3}c_{a} d^{3}c_{b} = d^{3}v_{a} d^{3}v_{b}$$

bei der Integration in Gl. (B.16) von Vorteil. Es gilt

$$A_{1} = \gamma_{a} c_{a}^{2} + \gamma_{b} c_{b}^{2}$$

$$= \frac{1}{\gamma_{a} + \gamma_{b}} \left[ (\gamma_{a} \underline{c}_{a})^{2} + (\gamma_{b} \underline{c}_{b})^{2} \right] + \underbrace{\frac{\gamma_{a} \gamma_{b}}{\gamma_{a} + \gamma_{b}}}_{\equiv \gamma_{ab}} \left[ \underline{c}_{a}^{2} + \underline{c}_{b}^{2} \right]$$

$$= \frac{1}{\gamma_{a} + \gamma_{b}} \left( \gamma_{a} \underline{c}_{a} + \gamma_{b} \underline{c}_{b} \right)^{2} - \frac{2 \gamma_{a} \gamma_{b} \underline{c}_{a} \cdot \underline{c}_{b}}{\gamma_{a} + \gamma_{b}} + \gamma_{ab} \left( \underline{c}_{a}^{2} + \underline{c}_{b}^{2} \right)$$

$$= (\gamma_{a} + \gamma_{b}) X^{2} + \gamma_{ab} (\underline{c}_{a} - \underline{c}_{b})^{2}$$

$$= (\gamma_{a} + \gamma_{b}) X^{2} + \gamma_{ab} g^{2} \qquad (B.25)$$

und

$$A_{2} = \gamma_{a} \underline{c}_{a} \cdot \underline{w}_{a} + \gamma_{b} \underline{c}_{b} \cdot \underline{w}_{b}$$

$$= \frac{\gamma_{a} \underline{c}_{a}}{\gamma_{a} + \gamma_{b}} \cdot \left(\gamma_{a} \underline{w}_{a} + \gamma_{b} \underline{w}_{a}\right) + \frac{\gamma_{b} \underline{c}_{b}}{\gamma_{a} + \gamma_{b}} \cdot \left(\gamma_{a} \underline{w}_{b} + \gamma_{b} \underline{w}_{b}\right)$$

$$= \frac{\gamma_{a} \underline{c}_{a} + \gamma_{b} \underline{c}_{b}}{\gamma_{a} + \gamma_{b}} \left(\gamma_{a} \underline{w}_{a} + \gamma_{b} \underline{w}_{b}\right) + \gamma_{ab} \left((\underline{c}_{a} - \underline{c}_{b}) \cdot \underline{w}_{a} + (\underline{c}_{b} - \underline{c}_{a}) \cdot \underline{w}_{b}\right)$$

$$= \underline{X} \cdot \left(\gamma_{a} \underline{w}_{a} + \gamma_{b} \underline{w}_{b}\right) + \gamma_{ab} \underline{g} \cdot \left(\underline{w}_{b} - \underline{w}_{a}\right)$$
(B.26)

Aus Gl. (B.25) folgt

$$f_{\gamma_a}^{(0)}(c_a) f_{\gamma_b}^{(0)}(c_b) = f_{\gamma_a + \gamma_b}^{(0)}(X) f_{\gamma_{ab}}^{(0)}(g)$$
(B.27)

111

Setzen wir nun Gl. (B.26) in das Produkt der Verteilungsfunktionen Gl. (B.22) ein und das Ergebnis in den Ausdruck für den Impulsaustausch in Gl. (B.16), so ergibt sich:

$$\underline{R}_{ab} = \mu_{ab} n_a n_b \iint d^3 X \, d^3 g \, \underline{g} \, g \, f^{(0)}_{\gamma_a + \gamma_b}(X) \, f^{(0)}_{\gamma_{ab}}(g) \, \mathfrak{Q}_{ab}(g) \cdot \left[ 1 + (\gamma_a \, \underline{w}_a + \gamma_b \, \underline{w}_b) \cdot \underline{X} + \gamma_{ab} \, (\underline{w}_b - \underline{w}_a) \cdot \underline{g} \right] \quad (B.28)$$

Der Ausdruck in den eckigen Klammern hat bezüglich der X-Integration die

Form  $\underline{A} \cdot \underline{X} + B$ . Da  $f_{\gamma_a + \gamma_b}^{(0)}(X)$  symmetrisch in X ist und über einen symmetrischen Bereich integriert wird, gilt

$$\int d^{3}X f^{(0)}_{\gamma_{a}+\gamma_{b}}(X) \left(\underline{A} \cdot \underline{X} + B\right) = B.$$
(B.29)

Aus Gl. (B.28) folgt dann

$$\underline{R}_{ab} = \mu_{ab} n_a n_b \int d^3g \, \underline{g} \, g \, \mathfrak{Q}_{ab}(g) \, f^{(0)}_{\gamma_{ab}}(g) \, \left(1 \, + \, \gamma_{ab} \, \left(\underline{w}_b \, - \, \underline{w}_a\right) \, \cdot \underline{g}\right).$$

Der erste Term ist ungerade in g und fällt daher bei der Integration über einen symmetrischen Bereich weg. Für den zweiten Term ergibt sich nach einigen Umformungen:

$$\underline{R}_{ab} = \frac{4\pi}{3} n_a n_b \mu_{ab} \gamma_{ab} (\underline{w}_b - \underline{w}_a) \int_0^\infty dg \ g^5 \left(\frac{\gamma_{ab}}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\gamma_{ab}}{2}g^2} \mathfrak{Q}_{ab}(g)$$

$$= \frac{4}{3} n_a n_b \mu_{ab} \left(\frac{8}{\pi \gamma_{ab}}\right)^{1/2} (\underline{w}_b - \underline{w}_a) \int_0^\infty d\xi \ \xi^5 e^{-\xi^2} \mathfrak{Q}_{ab}(\xi)$$

$$= \mu_{ab} n_a \tau_{ab}^{-1} (\underline{u}_b - \underline{u}_a).$$
(B.30)

 $\tau_{ab}$  ist die mittlere Stoßzeit zwischen Teilchen der Spezies a und b, welche durch den Ausdruck

$$\tau_{ab}^{-1} \equiv \frac{4}{3} n_b \left(\frac{8}{\pi \gamma_{ab}}\right)^{1/2} \int_{0}^{\infty} d\xi \ \xi^5 e^{-\xi^2} \mathfrak{Q}_{ab}(\xi)) \tag{B.31}$$

definiert ist. Mit  $\mathfrak{Q}_{ab}$ aus Gl. (B.14) kann  $\tau_{ab}^{-1}$ nun zu

$$\tau_{ab}^{-1} = \frac{16\pi^{1/2}}{3} n_b \left(\frac{\gamma_{ab}}{2}\right)^{3/2} \left(\frac{q_a q_b}{\mu_{ab}}\right)^2 \ln\Lambda$$
(B.32)

berechnet werden. Bei gleichen Temperaturen  $T=T_a=T_b$ läßt sich  $\gamma_{ab}$  vereinfachen:

$$\gamma_{ab} = \frac{\gamma_a \gamma_b}{\gamma_a + \gamma_b} = \frac{\frac{m_a m_b}{T_a T_b}}{\frac{m_a}{T_a} + \frac{m_b}{T_b}}$$
$$= \frac{1}{T} \mu_{ab}.$$
(B.33)

Daraus ergibt sich für die Stoßzeit  $\tau_{ab}$  in Gl. (B.32)

$$\tau_{ab}^{-1} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{\ln\Lambda n_b q_a^2 q_b^2}{\sqrt{\mu_{ab}} T^{3/2}}.$$
 (B.34)

Dies stimmt mit dem Ausdruck in [4] überein und wird auch im EMC3- und früher im B2-Code [32] verwendet.

### B.4 Energieaustausch

Eine analoge Rechnung zum Impulsaustausch liefert für den Energieaustausch:

$$Q_{ab} = 3 n_a \frac{\mu_{ab}}{m_a + m_b} \tau_{ab}^{-1} (T_b - T_a).$$
 (B.35)

Für  $T_e \sim T_i$  und  $m_e \ll m_i$  gilt auch  $\gamma_e \ll \gamma_i$  (vgl. Gl. (B.3)) und damit

$$\gamma_{ie} = \frac{\gamma_i \, \gamma_e}{\gamma_i + \gamma_e} \approx \gamma_e. \tag{B.36}$$

Desweiteren gilt  $\mu_{ie} \approx m_e$ , so dass  $\tau_{ie}^{-1}$  aus Gl. (B.32) durch

$$\tau_{ie}^{-1} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{\ln\Lambda n_e \, e^4 \, Z_i^2}{\sqrt{m_e} \, T_e^{3/2}} \tag{B.37}$$

113

angenähert werden kann. Damit kann der Wärmeaustausch zwischen Elektronen und Ionen geschrieben werden als

$$Q_{ie} = 3 n_i \frac{\mu_{ie}}{m_i + m_e} \tau_{ie}^{-1} (T_e - T_i) \approx \frac{3 m_e}{m_i} \frac{n_i}{\tau_{ie}} (T_e - T_i).$$
(B.38)

Mit  $n_i/\tau_{ie} = n_e/\tau_{ei}$  ergibt dies

$$Q_{ie} = \frac{3m_e}{m_i} \frac{n_e}{\tau_{ei}} (T_e - T_i).$$
(B.39)

 $\tau_{ei}$ stimmt mit der mittleren Stoßzeit für Elektronen und Ionen überein, wie sie von Braginskii [4] angegeben wird.

### Anhang C

### Gitterkoordinaten

#### C.1 Bilineare Interpolation

Die bilineare Interpolation einer Funktion f(r, s) wird in dieser Arbeit neben der Beschreibung von Magnetfeldlinien in Gitterzellen auch für die Berechnung von Ratenkoeffizienten (s. Kapitel 2.3.1 auf Seite 9) angewandt.

Für  $r \in [r_1, r_2]$  und  $s \in [s_1, s_2]$  soll die Funktion f(r, s) durch die (gegebenen) Eckpunkte  $f_1 \equiv f(r_1, s_1), f_2 \equiv f(r_1, s_2), f_3 \equiv f(r_2, s_2), f_4 \equiv f(r_2, s_1)$ bilinear interpoliert werden. In Abb. C.1 ist dieser Bereich in der *r*-*s*-Ebene gezeigt.



Abbildung C.1: Darstellung des Interpolations intervalls  $[r_1, r_2], [s_1, s_2]$  für die Funktion f(r, s) und der Gewichts-Koeffizienten  $F_1, F_2, F_3, F_4$  in der r-s-Ebene.

Der interpolierte Funktionswert an der Stelle (r, s) ergibt sich aus der Summe der Funktionswerte  $f_i$  an den Eckpunkten i, wobei jeder Summand mit

dem normierten Flächen<br/>inhalt  $F_i/F$  der diagonal gegenüberliegenden Fläche gewichtet wird. Der Flächen<br/>inhalt des gesamten Rechtecks sei mit

$$F = \sum_{i=1}^{4} F_i = (r_2 - r_1) (s_2 - s_1)$$
(C.1)

abgekürzt. Dann ergibt sich der interpolierte Funktionswert  $f^{\text{int}}(r,s)$  zu

$$f^{\text{int}}(r,s) = \frac{1}{F} \sum_{i=1}^{4} F_i f_i,$$
 (C.2)

oder explizit

$$f^{\text{int}}(r,s) = \frac{1}{F} \left[ f_1 (r_2 - r) (s_2 - s) + f_2 (r_2 - r) (s - s_1) + f_3 (r - r_1) (s - s_1) + f_4 (r - r_1) (s_2 - s) \right]. \quad (C.3)$$

Dies läßt sich zu Ausdrücken proportional zu 1, r, s und r s zusammenfassen, was im Folgenden für zwei Beispiele durchgeführt wird.

#### Beispiel 1

Normierte Koordinaten r und s, d.h.  $r, s \in [0, 1]$ , wie sie z.B. für die Interpolation von Ratenkoeffizienten  $(f_i = \log \mathcal{R}_i^{(X)}, r = \log n_e, s = \log T_e)$  verwendet werden:

$$f^{\text{int}}(r,s) = f_1 + r\left(f_4 - f_1\right) + s\left(f_2 - f_1\right) + rs\left(f_1 - f_2 + f_3 - f_4\right)$$
(C.4)

#### Beispiel 2

Symmetrische Koordinaten r und s, d.h.  $r, s \in [-1, 1]$ , wie sie z.B. für die Interpolation von Feldlinien in einer Gitterzelle  $(f_i = \underline{x}_i)$  eingesetzt werden:

$$f^{\text{int}}(r,s) = \frac{1}{4} \left[ \left( f_1 + f_2 + f_3 + f_4 \right) + r \left( -f_1 - f_2 + f_3 + f_4 \right) + s \left( -f_1 + f_2 + f_3 - f_4 \right) + r s \left( f_1 - f_2 + f_3 - f_4 \right) \right]$$
(C.5)

### C.2 Koordinatentransformation

Im EMC3 werden Feldlinien sowie die Bahnen von MC-Teilchen, die sich auf Feldlinien bewegen, über Gitterkoordinaten (intrinsiche oder auch Flussröhren-Koordinaten genannt) [r, s, u] beschrieben. Die Position eines Teilchens entlang einer Feldlinie mit Koordinaten  $r = r_0$  und  $s = s_0$  ist durch die Koordinate u bestimmt. Die reale Position

$$\underline{x} = \begin{pmatrix} R \\ Z \\ \varphi \end{pmatrix} \qquad (\text{Zylinderkoordinaten}) \tag{C.6}$$

wird über eine Interpolation der Gitterpunkte bzgl. der Koordinaten [r,s,u] bestimmt. Seien  $\underline{x}_1^{(k)}, \underline{x}_2^{(k)}, \underline{x}_3^{(k)}, \underline{x}_4^{(k)}$  und  $\underline{x}_1^{(k+1)}, \underline{x}_2^{(k+1)}, \underline{x}_3^{(k+1)}, \underline{x}_4^{(k+1)}$  die Gitterpunkte in der  $\varphi_{k^-}$  bzw.  $\varphi_{k+1}$ -Ebene, dann sind durch

$$\underline{x}_{i}(u) = \underline{x}_{i}^{(k)} + u\left(\underline{x}_{i}^{(k+1)} - \underline{x}_{i}^{(k)}\right), \qquad u \in [0, 1]$$
(C.7)

die Eckpunkte des Querschnitts bei  $\varphi(u)$  gegeben (vgl. Abb. 4.2). Gl. (C.5) liefert dann mit  $f_i = \underline{x}_i$  die Interpolationsvorschrift für die Koordinaten in Zylinderkoordinaten:

$$\underline{x}(r,s,u) = \underline{x}_A(u) + r \underline{x}_B(u) + s \underline{x}_C(u) + r s \underline{x}_D(u), \quad (C.8)$$

wobei die Koeffizienten  $\underline{x}_A, \underline{x}_B, \underline{x}_C$  und  $\underline{x}_D$  durch

$$\underline{x}_{A}(u) = \frac{1}{4} \left( \underline{x}_{1}(u) + \underline{x}_{2}(u) + \underline{x}_{3}(u) + \underline{x}_{4}(u) \right)$$
(C.9)

$$\underline{x}_B(u) = \frac{1}{4} \left( \underline{x}_4(u) - \underline{x}_1(u) + \underline{x}_3(u) - \underline{x}_2(u) \right)$$
(C.10)

$$\underline{x}_C(u) = \frac{1}{4} \left( \underline{x}_2(u) - \underline{x}_1(u) + \underline{x}_3(u) - \underline{x}_4(u) \right)$$
(C.11)

$$\underline{x}_{D}(u) = \frac{1}{4} \left( \underline{x}_{1}(u) - \underline{x}_{2}(u) + \underline{x}_{3}(u) - \underline{x}_{4}(u) \right)$$
(C.12)

gegeben sind und über Gl. (C.7) von u abhängen. Da die Endflächen einer Gitterzelle in einer poloidalen Ebene liegen, verschwindet die  $\varphi$ -Komponente in Gl. (C.10) bis Gl. (C.12) und Gl. (C.8) reduziert sich für diese Komponente zu

$$\varphi = \varphi_k + u \left(\varphi_{k+1} - \varphi_k\right) \tag{C.13}$$

Die Rücktransformation von Zylinder- in Gitterkoordinaten folgt für die u-Komponente direkt aus Gl. (C.13):

$$u = \frac{\varphi - \varphi_k}{\varphi_{k+1} - \varphi_k} \tag{C.14}$$

Zur Bestimmung der r- und s-Komponente werden die R- und Z-Komponente von Gl. (C.8) im Folgenden getrennt behandelt. Mit den Abkürzungen

$$R_0 \equiv R_A - R, \qquad Z_0 \equiv Z_A - Z$$

kann die R-Komponente von Gl. (C.8) nach r aufgelöst

c

$$r = -\frac{R_0 + R_c \cdot s}{R_b + R_d \cdot s} \tag{C.15}$$

und in die Z-Komponente von Gl. (C.8) eingesetzt werden. Dies ergibt eine quadratische Gleichung in s, welches anschließend in Gl. (C.15) für r eingesetzt werden kann.

$$0 = \underbrace{(Z_c R_d - Z_d R_c)}_{a} s^2 + \underbrace{(Z_0 R_d - Z_b R_c + Z_c R_b - Z_d R_0)}_{b} s + (Z_0 R_b - Z_b R_0)$$
(C.16)

$$=as^2 + bs + c \tag{C.17}$$

Es ist nicht ohne weiteres ersichtlich, wann diese Gleichung für  $s \in [-1, 1]$ eindeutig lösbar ist. Eine Methode die quadratische Gleichung für s zu umgehen wäre z.B. eine Aufteilung des viereckigen Querschnitts in zwei Dreiecke  $(\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_4)$  und  $(\underline{x}_2, \underline{x}_3, \underline{x}_4)$ , wie Abb. C.2 zeigt.



Abbildung C.2: Aufteilung eines viereckigen Querschnitts in zwei Dreiecke. Zur Interpolation in einem Dreieck wird dieses zu einem Parallelogramm erweitert.

Zur Interpolation in dem Dreieck ( $\underline{x}_1, \underline{x}_2, \underline{x}_4$ ) wird dieses um den Punkt  $\underline{\tilde{x}_3}$ zu einem Parallelogramm erweitert. Dadurch wird nach Gl. (C.12)  $x_D = 0$ und der bilineare Anteil verschwindet:

$$\underline{x} = \underline{x}_A + r \, \underline{x}_B + s \, \underline{x}_C \tag{C.18}$$

oder in Matrix-Schreibweise mit  $\underline{x}_A \equiv \underline{x} - \underline{x}_A$ :

$$(\underline{x}_B, \underline{x}_C) \begin{pmatrix} r\\ s \end{pmatrix} = \underline{x}_{A}$$
(C.19)

Diese Gleichung ist eindeutig lösbar, falls det  $(\underline{x}_B, \underline{x}_C) \neq 0$ .

### Literaturverzeichnis

- ADAS Manual. http://adas.phys.strath.ac.uk/documentation.php, 2.7 edition.
- [2] Behringer, K. Description of the Impurity Transport Code STRAHL. Technical Report 08, JET-R, 87.
- [3] Braams, B.J. Computational Studies in Tokamak Equilibrium and Transport. PhD thesis, Rijksuniversiteit Utrecht, Nederlands, 1986.
- [4] Braginskii, S.I. Transport processes in a plasma. Reviews of Plasma Physics 1, pages 205–311, 1965.
- [5] Chapman, S. Thermal Diffusion in Ionized Gases. Proc. Phys. Soc., 72:353, 1958.
- [6] Eckstein, W.; Bohdansky, J.; Roth, J. Physical Sputtering. Suppl. Nucl. Fusion, 1:51, 1991.
- [7] Eich, T.H. Struktur des Magnetfeldes und des Plasmas in der laminaren Zone des Dynamischen Ergodischen Divertors. Technical Report 3776, Forschungszentrum Jülich, Institut für Plasmaphysik, 2000.
- [8] Feng, Y.; Kisslinger, J.; Sardei, F. Formulation of a Monte Carlo model for edge plasma transport. 27th, EPS Conference on Contr. Fusion and Plasma Phys., 24B:1188–1191, 2000.
- [9] Feng, Y.; Sardei, F. A simple highly accurate field-line mapping technique for three-dimensional Monte Carlo modeling of plasma edge transport. *Physics of Plasmas*, 12(052505), 2005.
- [10] Feng, Y.; Sardei, F.; Grigull, P.; McCormick, K.; Kisslinger, J.; Reiter, D.; Igitkhanov, Y. Transport in island divertors: physics, 3D modelling and comparison to first experiments on W7-AS. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 44:611–625, 2002.
- [11] Feng, Y.; Sardei, F.; Kisslinger, J. 3D fluid modelling of the edge plasma by means of a Monte Carlo technique. *Journal of Nucelar Materials*, 266-269:812–818, 1999.

- [12] Feng, Y.; Sardei, F.; Kisslinger, J.; Grigull, P. A 3D Monte Carlo code for plasma transport in island divertors. *Journal of Nuclear Materials*, 241-243:930–934, 1997.
- [13] Feng, Y.; Sardei, F.; Kisslinger, J.; Grigull, P.; McCormick, K.; Reiter, D. 3D Edge Modeling and Island Divertor Physics. *Contrib. Plasma Physics*, 44:57–69, 2004.
- [14] Finken, K.H.; Abdullaev, S.S.; Jakubowski, M.; Lehnen, M; Nicolai, A.; Spatschek, K.H. The structure of magnetic field in the TEXTOR-DED. https://tec.ipp.kfa-juelich.de/textor/ded/report\_DED.pdf.
- [15] Finken, K.H.; Wolf, G.H. Background, motivation, concept and scientific aims for building a dynamic ergodic divertor. *Fusion Engineering* and Design, 37:337–340, 1997.
- [16] Goldston, R.J.; Rutherford, P.H. Introduction to Plasma Physics. Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1995.
- [17] Haberscheidt, T. MHD-Gleichgewichte im TEXTOR Tokamak. Diplomarbeit, Heinrich-Heine Universität Düsseldorf, 2002.
- [18] Harting, D.; Reiter, D. 3D Monte-Carlo-Simulation der ergodisierten Randschicht von TEXTOR-DED. Technical Report 4173, Forschungszentrum Jülich, Institut für Plasmaphysik, 2005.
- [19] Hinton, F.L. Collisional Transport in Plasmas. In Rosenbluth, M.N.; Sagdeev, R.Z., editor, *Handbook of Plasma Physics*, chapter 1.5. North-Holland Publishing Company, 1983.
- [20] Hirshman, S.P. Transport of a multiple-ion species plasma in the Pfirsch-Schlüter regime. The Physics of Fluids, 20(4):589–598, 1977.
- [21] Itikawa, Y.; Hara, S.; Kato, T.; Nakazaki, S, Pindzola, M.S.; Crandall, D.H. Electron-impact cross sections and rate coefficients for excitations of carbon and oxygen ions. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 33(1):149–193, 1985.
- [22] Jancel, R.; Kahan, T. Electrodynamics of Plasmas. John Wiley and sons LTD., 1966.
- [23] Janev, R.K. Atomic and Molecular Processes in Fusion Edge Plasmas. New-York, Plenum Pr., 1995.
- [24] Janev, R.K.; Phaneuf, R.A.; Hunter, H.T. Recommended cross sections for electron capture and ionization in collisions of  $C^{q+}$  and  $O^{q+}$  ions with H, He, and H<sub>2</sub>. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 40(2):249–281, 1988.
- [25] JuMP Juelich MultiProcessor. http://jumpdoc.fz-juelich.de/.

- [26] Kim, D.K.; Hong, S.H. Fluid-particle hybrid simulation on the transports of plasma, recycling neutrals, and carbon impurities in the Korea Superconducting Tokamak Advanced Research devertor region. *Physics* of Plasmas, 12(062504):1–9, 2005.
- [27] Kobayashi, M.; Feng, Y.; Sardei, F.; Reiter, D.; Finken, K.H.; Reiser, D. 3D numerical transport study of the edge ergodized plasma in TEXTOR-DED. *Nuclear Fusion*, 44:64–73, 2004.
- [28] Kobayashi, M.; Feng, Y.; Sardei, F.; Reiter, D.; Reiser, D.; Finken, K.H. Implementation of the EMC3-EIRENE code on TEXTOR-DED: accuracy and convergence study. *Contrib. Plasma Phys.*, 44:25–30, 2004.
- [29] Lao, L.L.; St.John, H.; Stambaugh, R.D.; Kellman, A.G.; Pfeiffer, W. Reconstruction of Current Profile Parameters and Plasma Shapes in Tokamaks. *Nuclear Fusion*, 25:1611–1622, 1985.
- [30] Lehnen, M.: IPP, FZJ, Sommer 2006. Private Kommunikation.
- [31] Lotz, W. Optimiertes Programm für numerische Rechnungen in toroidalen Magnetfeld-Konfigurationen. Fassung für Benutzer der GOURDON-Programme, die von W. Lotz revidiert wurde. Max-Planck-Institut für Plasmaphysik Garching, Februar 1983 unveröffentlicht.
- [32] Maddison, G.P.; Helander, P.; Cornford, S.L. Fluid modelling of edge plasmas with arbitrary impurity abundances. *Contrib. Plasma. Phys.*, 38:236, 1998.
- [33] O'Mullane, M.G., 2006. Private Kommunikation.
- [34] Patankar, S.V. Numerical heat transfer and fluid flow. McGraw-Hill Book Company, 1980.
- [35] Reiter, D. Homepage des Neutralteilchencodes EIRENE. http://www.eirene.de.
- [36] Risken, H. The Fokker-Planck Equation. Springer-Verlag Berlin, 2 edition, 1989.
- [37] Schmitz, O.; Harting, D.; Abdullaev, S.; Brezinsek, S.; Finken, K.H.; Frerichs, H.; Jakubowski, M.; Lehnen, M.; Loozen, X.; Mertens, Ph.; Reiter, D.; Samm, U.; Schweer, B.; Sergienko, G.; Tokar, M.Z.; Unterberg, B.; Wolf, R.C. and the TEXTOR Team. Characterization of transport in the stochastic edge layer of TEXTOR by analysis of the radial and poliodal distribution of electron density and temperature. *Journal of Nuclear Materials, PSI 17*, 2006. submitted.
- [38] Schneider, R.; Bonnin, X.; Borrass, K.; Coster, D.P.; Kastelewicz, H.; Reiter, D.; Rozhansky, V.A.; Braams, B.J. Plasma Edge Physics with B2-Eirene. *Contrib. Plasma Phys.*, 46:3–191, 2006.

- [39] Stangeby, P.C. The Plasma Boundary of Magnetic Fusion Devices. Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia, 2000.
- [40] Summers, H.P.; Dickson, W.J.; O'Mullane, M.G.; Badnell, N.R.; Whiteford, A.D.; Brooks, D.H.; Lang, J.; Loch, S.D.; Griffin, D.C. Ionization state, excited populations and emission of impurities in dynamic finite density plasmas: I. The generalized collisional-radiative model for light elements. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 48:263–293, 2006.
- [41] Wiegmann, C. Real-time detection of magnetohydrodynamic equilibria at the nuclear fusion experiment TEXTOR. Diplomarbeit, Bayrische Julius-Maximilians Universität Würzburg, 2006.
- [42] Zhdanov, V.M. Transport Processes in Multicomponent Plasma. Taylor and Francis, 2002.
- [43] Zwingmann, W. Equilibrium analysis of steady state tokamak discharges. Nuclear Fusion, 43:842–850, 2003.

# Index

A	Impulsbilanz der Verunreinigungsionen 29
Atomare Prozesse	der Wasserstoffionen
С	Interpolation bilineare115
CR-Modell siehe Stoß-Strahlungs-Modell	Κ
D	Korona-Modell8
DED-Störfeld	Μ
Е	Magnetfeldgitter 36, 39
EIDENE C. J. 25	Р
EIRENE-Code	Plasmaradiusgroßer $R_{maj}$ kleiner $r_{min}$ 33Private-Flusszone52Prozessrate $R^{(X)}$
F	Q
Feldlinie ergodische	q-Profil
G	Recycling-Fluss $\Gamma_{\rm rec}$
GOURDON-Code40	dielektronische
Н	S
Heizleistung $\mathbf{P}_{\text{heat}}$	Stoß-Strahlungs-Modell 8
I	Т
Impulsaustausch 19	Teilchenbilanz

der Verunreinigungsionen 31	
der Wasserstoffionen 25	,
TEXTOR-DED	,
Thermokräfte 19	)

### $\mathbf{V}$

Verbindungslänge $L_c$ 5	<b>52</b>
Verunreinigungen	1
Verunreinigungsgehalt $M_{\rm imp}$ 5	59

## Danksagung

Zum Abschluss möchte ich mich an dieser Stelle bei meiner Familie, Freunden, Kommilitonen und Kollegen für ihre Unterstützung während meines Studiums und besonders während der Diplomarbeit bedanken.

Ganz besonderen Dank richte ich an Herrn Prof. Detlev Reiter für seine hervorragende Betreuung und die nette Atmosphäre im Arbeitsalltag.

Desweiteren bin ich Herrn Prof. H.-J. Kull sehr dankbar, der es mir durch die Übernahme des Erstgutachtens ermöglicht hat diese Arbeit am Forschungszentrum Jülich zu schreiben.

Auch möchte ich mich bei Herrn Derek Harting bedanken, der mich mit dem EMC3-Code vertraut gemacht und sich für meine vielen Fragen stets Zeit genommen hat.

Heinke