

Vergleich von Transportmodellen für Feldlinien
und Teilchen in stochastischen Magnetfeldern
mittels symplektischer Abbildungen

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

vorgelegt von

Marc Eberhard

aus

Tallahassee (Florida)

Düsseldorf

11. Januar 2000

Gedruckt mit der Genehmigung der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

1. Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr. K. H. Spatschek
2. Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr. D. Reiter

Tag der mündlichen Prüfung: 5. Mai 2000

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Diffusionsmodelle	11
2.1	Random Walk	11
2.2	Diffusion mit Grenzen	12
2.2.1	Differentialgleichung	12
2.2.2	Randbedingungen	13
2.2.3	Anfangsbedingung	14
2.2.4	Fouriertransformation	14
2.2.5	Fouriertransformation der Differentialgleichung	16
2.2.6	Analytische Lösung	17
2.2.7	Momente der Wahrscheinlichkeitsdichte	18
2.3	Konstanter Diffusionskoeffizient	20
2.4	Zeitabhängiger Diffusionskoeffizient	21
2.5	Verschobene Verteilungen	21
2.6	Grenzfall für $\Delta \rightarrow \infty$	22

3	Symplektische Integratoren	23
3.1	Hamiltonsche Systeme	24
3.1.1	Zeitabhängige Systeme	24
3.1.2	Zeitunabhängige Systeme	25
3.1.3	Formale Lösung	27
3.2	Genäherte Lösungen	27
3.2.1	Näherung für Summen	27
3.2.2	Bedeutung des Kommutators	36
3.2.3	Näherung für Produkte	37
3.2.4	Verallgemeinerung für Summen und Produkte	42
4	Tokamap	43
4.1	Korrespondierende Hamiltonfunktion	43
4.1.1	q-Profil	44
4.1.2	Herleitung der Tokamap	44
4.1.3	Symplektischer Integrator	46
4.1.4	Vergleich	52
4.2	Symmetrische Abbildung	52
4.2.1	Herleitung	52
4.2.2	Vergleich	55
4.3	Schlußfolgerungen	57
4.3.1	Auswertung der Deltafunktion	57
4.3.2	Verteilungen endlicher Breite	57
4.3.3	implizite Abbildungen	59

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	5
5 Das Modellsystem	61
5.1 Hamiltonfunktion	61
5.1.1 q-Profil	62
5.1.2 Störung	62
5.1.3 Integrator	63
5.1.4 Vergleich verschiedener Schrittweiten	65
5.1.5 Poincaré-Schnitte	67
5.2 Teilchendriften	69
5.3 Parallele Dynamik und Stöße	72
6 Transporteigenschaften	75
6.1 Theoretische Modelle	75
6.1.1 Langevin Gleichungen	76
6.1.2 Quasilineare Theorie	77
6.1.3 Modell von Rechester und Rosenbluth	80
6.2 Feldlinientransport	84
6.2.1 Topologie des Systems	84
6.2.2 Ljapunovexponenten	88
6.2.3 Begrenzte Diffusion	90
6.3 Teilchentransport	96
6.3.1 Klassische Transporttheorie	97
6.3.2 Räumlich aufgelöster Diffusionskoeffizient	99
6.3.3 Mittlere freie Weglänge	106
6.3.4 Vergleich quasilineare Theorie	109
6.3.5 Vergleich mit dem Modell von Rechester und Rosenbluth	112

7 Zusammenfassung	115
Literaturverzeichnis	117
Danksagung	123

Kapitel 1

Einleitung

Von dem Wunsch geleitet, eine neue Energiequelle für die Menschheit zu erschließen, sind in den vergangenen Jahren große experimentelle Fortschritte auf dem Gebiet der kontrollierten Kernfusion vollbracht worden. Trotzdem hat es sich herausgestellt, daß die Einschließung eines heißen Plasmas in magnetische Felder weiterhin schwieriger ist, als ursprünglich angenommen. Aus einem schlechten magnetischen Einschluß resultieren aber hohe Verlustraten für Teilchen und Energie, was wiederum direkt zu Belastungsproblemen der Wände führt [28].

Da das Innere eines Plasmas nur sehr schwer meßtechnisch zu erfassen ist, herrscht Unklarheit über die Ursachen für diesen erhöhten Transport [12]. Eine Vielzahl von Modellen beschreibt Teilaspekt von Plasmen und liefert Hinweise und Zusammenhänge, eine endgültige Erklärung steht aber weiterhin aus. So wird von vielen Forschern das Problem des „anormalen“ Transports [4, 46] in Fusionsplasmen als das entscheidende Hindernis auf dem Weg zur Energieerzeugung durch Fusion gesehen.

Ein solches Plasma ist ein komplexes physikalisches System einer großen Anzahl wechselwirkender geladener Teilchen [3, 51]. Die Bewegungsgleichungen der einzelnen Teilchen, sowie die zeitliche Entwicklung des elektromagnetischen Feldes, sind im Prinzip wohlbekannt, jedoch ist eine direkte numerische Berechnung eines solchen Systems aufgrund der hohen Anzahl von Teilchen nicht möglich, weder mit vorhandenen Rechenanlagen noch mit zukünftigen. Dies ist ein Unterschied zu vielen anderen physikalischen Experimenten. Das System kann nicht beliebig vereinfacht oder verkleinert werden. Es ist nicht möglich nur einzelne Atome zur Fusion zu bringen (zumindest nicht, wenn

man dabei auch noch *nutzbare* Energie gewinnen möchte), man benötigt sofort ein komplexes System. Andererseits sind aber auch die Größenskalen im Experiment nicht so deutlich getrennt, daß es möglich wäre statistische Näherungen ohne Schwierigkeiten zu verwenden. Zusammen mit der schwierigen oder teilweise unmöglichen Bestimmung von für die Theorie wichtigen Größen, wie dem elektromagnetischen Feld im Inneren eines Plasmas, ist die Entwicklung einer umfassenden theoretischen Beschreibung eines solchen Systems eine gewaltige Herausforderung.

So werden neben einigen verschiedenen selbstkonsistenten Flüssigkeitsmodellen [15, 50, 60] auch Teilchenbilder verwendet [21, 31, 33, 47], die die Wechselwirkungen der Teilchen untereinander entweder gar nicht oder nur statistisch berücksichtigen. Dieser letzteren Klasse von Modellen sind auch die in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen zuzuordnen. Durch die Gyration der Teilchen im Magnetfeld, mit durchwegs kleinen Radien, findet eine starke Kopplung zwischen Verlauf der Feldlinien und der Bewegung der Teilchen statt. Man kann also das Problem erheblich reduzieren, indem man den Verlauf der Feldlinien als dominanten Anteil betrachtet. Von diesem Verlauf weichen die Mittelpunkte der Gyrationbewegung der Teilchen durch Driften und Stöße ab. Beides läßt sich berücksichtigen, so daß aus der Dynamik der Feldlinien, auf die der Teilchen zurück geschlossen werden kann. Aufgrund der kleinen Gyrationradien ist die Ersetzung der Teilchenpositionen durch die der Gyrationzentren unkritisch und für die Rechnung von großem Vorteil, da die auf einer sehr schnellen zeitlichen Skala stattfindende Gyration vernachlässigt werden kann [38].

Das Problem ist dadurch im wesentlichen auf die Verfolgung von Feldlinien des einschließenden Magnetfeldes reduziert [52]. Allerdings kann ein solches Modell aufgrund der fehlenden Rückwirkung der Teilchen auf das elektromagnetische Feld keine Effekte beschreiben, die auf einem solchen Austausch beruhen. Diese Arten von Instabilitäten lassen sich nur in einem selbstkonsistenten Flüssigkeitsbild des Plasmas behandeln. Dafür hat man aber die Möglichkeit den Einfluß der Geometrie und den von statischen Störungen des Magnetfeldes auf die Bewegungen der einzelnen Teilchen sehr detailliert zu studieren [2]. Diese Informationen sind dann wiederum wichtige Ausgangspunkte zur Verbesserung von Flüssigkeitsbildern, so daß insgesamt ein immer konsistenteres und genaueres Modell für Hochtemperaturplasmen entsteht.

Dabei ergeben sich die makroskopischen Größen der Flüssigkeitsmodelle aus entsprechend gewichteten Mittelwerten über Ensembles von mikroskopischen Teilchen. Die eigentlich interessierenden Größen enthalten also keine Informationen über individuelle Teilchen mehr, sondern nur noch Informationen über

die Statistik vieler Teilchenbewegungen. Deshalb ist es nicht nötig tatsächlich jede einzelne Teilchenbahn exakt zu berechnen, es reicht wenn das Mittel über viele Bahnen die gleiche Statistik liefert [59]. Dies reduziert den Rechenaufwand erheblich, da es genügt die exakten Bahnen der Teilchen hinreichend genau anzunähern. Man kann also die Integration der Teilchenbahnen durch eine Abbildung ersetzen. Dadurch entsteht natürlich zum einen das Problem, eine solche Abbildung zu finden, und zum anderen das Problem, die Äquivalenz von untersuchtem System und Abbildung zu zeigen.

Hierbei stellt es sich als vorteilhaft heraus, daß das Magnetfeld aufgrund seiner Divergenzfreiheit als ein Hamiltonsches System formuliert werden kann, wobei eine der Feldkoordinaten die Rolle der Zeit übernimmt [23, 34]. Die Verfolgung von Feldlinien ist also gleichbedeutend mit einer zeitlichen Integration des korrespondierenden Hamiltonschen Systems. Dadurch können auf Hamiltonsche Systeme spezialisierte Verfahren verwendet werden. Unter diesen befindet sich eine besonders gute Klasse von Integratoren, nämlich die der symplektischen Integratoren. Diese zeichnen sich durch hervorragende Stabilität und sehr getreue Abbildung des Phasenraums des zugrundeliegenden Systems aus [17, 30]. Und, was in diesem Zusammenhang von größter Bedeutung ist, auch dafür, daß diese Eigenschaften selbst bei großen Schrittweiten lange erhalten bleiben [32]. Hierdurch besteht die Möglichkeit einen solchen Integrator als Abbildung zu „mißbrauchen“. Auch das Problem, die Äquivalenz zwischen Abbildung und System zu zeigen, ist damit auf triviale Weise gelöst, da man die Schrittweite kontinuierlich reduzieren und somit von der Abbildung fließend zur numerischen Integration wechseln kann. Der Nachteil, daß die Ableitung eines solchen Integrators mit erheblichem mathematischen Aufwand verbunden ist, wird durch die Güte des erhaltenen Integrators mehr als kompensiert. Außerdem ist es möglich ein konstruktives Verfahren für die Ableitung solcher Integratoren für in der Plasmaphysik relevante Systeme anzugeben.

Dies zu demonstrieren, damit Transportgrößen zu berechnen und die Beziehungen zu anderen Ansätzen und Methoden zu vergleichen, ist das erklärte Ziel dieser Arbeit. Der Aufbau beginnt deshalb zuerst mit einem einfachen analytischen Referenzmodell einer begrenzten Diffusion (Kapitel 2) als grundlegendster Möglichkeit Transportphänomene zu beschreiben. Der klassische Ansatz einer unbegrenzten Diffusion ist in der Plasmaphysik nicht angebracht, da die Längenskalen nicht unterschiedlich genug sind, als daß man die Begrenzungen des Systems vernachlässigen könnte. Anhand dieses einfachen analytischen Modells läßt sich im Vergleich mit den numerisch berechneten Transportgrößen die Frage beantworten, ob und unter welchen

Einschränkungen die Bewegung von Feldlinien als diffusiv bezeichnet werden kann.

Anschließend werden zuerst die mathematischen Methoden zur Ableitung symplektischer Integratoren im Detail untersucht (Kapitel 3) und diese Methoden dann zur Überprüfung der Korrespondenz zwischen der von Balescu [6] vorgeschlagenen Tokamap und dem korrespondierenden Hamiltonschen System verwendet (Kapitel 4). Hieraus ergeben sich interessante Rückschlüsse über die spezielle Methode der Ableitung von Abbildung durch die Verwendung von δ -Funktionen in Hamiltonschen Systemen. Außerdem wird gezeigt, wie gut oder schlecht eine solche zeitlich lokalisierte Störung auch eine zeitlich ausgedehnte Störung beschreiben kann.

Auf diesen Erkenntnissen aufbauend wird dann ein realistisches Hamiltonsches System zur Berechnung von Transportgrößen beschrieben (Kapitel 5), ein symplektischer Integrator dafür abgeleitet und die Ergebnisse mit denen aus der Literatur und dem anfangs vorgestellten analytischen Modell verglichen (Kapitel 6). Hieraus lassen sich einige wichtige grundlegende Aussagen über den durch Feldlinien erzeugten Transport in Fusionsexperimenten gewinnen. Die erhaltenen Ergebnisse werden abschließend nochmals in kompakter Form zusammengefaßt.

Kapitel 2

Diffusionsmodelle

Einer der einfachsten Ansätze zur Beschreibung von Transportphänomenen ist die Annahme eines Diffusionsprozesses. Aufgrund äußerst anschaulicher Formeln lassen sich auf diese Weise leicht Diffusionskoeffizienten berechnen. Bei genauerer Betrachtung stellen sich diese Koeffizienten jedoch oft mehr als Zufallszahlen heraus denn als sinnvolle Transportgrößen. Insbesondere ist die Angabe von Diffusionskoeffizienten zweifelhaft, wenn künstlich Zeitskalen eingeführt werden, weil das System begrenzt ist und deshalb für lange Zeiten kein lineares Anwachsen der Varianz zeigen kann.

2.1 Random Walk

Hat man eine zufällige, von der momentanen Position nicht abhängige, Bewegung in einem unendlich ausgedehnten System vorliegen, so geht der zeitabhängige Diffusionskoeffizient

$$D(t) = \frac{\langle r(t) - r(0) \rangle^2}{2t}$$

für große Zeiten gegen einen konstanten Wert und man erhält

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} D(t)$$

als den Diffusionskoeffizient, welcher das gegebene System charakterisiert. Für viele Systeme ist dies eine ausreichende Methode zur Charakterisierung des Transports. Die praktische Berechnung ist oft mit großem Aufwand verbunden, weil der Diffusionskoeffizient als Limes gegen eine unendlich späte Zeit definiert ist und in vielen Fällen nur langsam gegen diesen Wert konvergiert.

Auch das Ensemblemittel stellt eine langsam konvergierende Funktion dar, in diesem Fall eine Monte-Carlo-Integration, und geht mit $1/\sqrt{N}$ gegen den korrekten Wert. Dies bedeutet die Berechnung von vielen Testteilchen im System für lange Zeiten. Im Falle eines ergodischen Systems, sind Ensemble- und Zeitmittel austauschbar, was meist zu einer schnelleren Konvergenz der Grenzwerte führt.

2.2 Diffusion mit Grenzen

Hat man nun jedoch ein räumlich begrenztes System vorliegen, so konvergiert der zeitabhängige Diffusionskoeffizient stets gegen 0, da die Varianz begrenzt ist. Oft wird dann eine „charakteristische“ Zeit gewählt, um für den Koeffizienten eine von 0 verschiedene Zahl zu erhalten. Diese Zeit ist jedoch völlig willkürlich, weswegen auch der Aussagewert so berechneter Koeffizienten in hohem Maße fragwürdig bleibt. Um dieses Problem zu umgehen, ist es nötig, die Begrenzung des Systems von Anfang an mit in die Berechnung einzubeziehen [22].

Aufgrund der endlichen Größe jedes Experiments in der Plasmaphysik, liegt nie der Idealfall eines unbegrenzten Systems vor. Auch näherungsweise ist dieser Fall nicht gegeben, da die Skalen für Teilchenbewegungen im System und dem System selber nur um eine bis zwei Größenordnungen getrennt sind. Deshalb sind Transportberechnungen auf der Basis eines unendlich ausgedehnten Systems wenig realistisch. Im folgenden soll daher als einfaches analytisches Referenzmodell für die späteren Berechnungen die Diffusionsgleichung für ein begrenztes System gelöst werden.

2.2.1 Differentialgleichung

Ausgehend von Kontinuitätsgleichung und der Annahme, daß der Dichtefluß im System linear vom Gradienten der Dichte abhängt, ergibt sich die bekannte Differentialgleichung

$$\partial_t u(\psi, t) = D(t) \cdot \partial_\psi^2 u(\psi, t)$$

für ein diffusives System. Zwecks besserer Anschaulichkeit ist das System eindimensional gewählt. Die Erweiterung auf mehrere Dimensionen ist trivial. Außerdem wird für Vergleiche mit Berechnungen des radialen Transports in Fusionsexperimenten kein mehrdimensionales Modell benötigt.

Weiterhin ist der Diffusionskoeffizient zeitabhängig gewählt, um auch sub- oder superdiffusive Systeme beschreiben zu können, bei denen sich der Diffusionskoeffizient aufgrund des Systems selber zeitlich ändert. Dies ist nicht zu verwechseln mit der bereits beschriebenen Zeitabhängigkeit des numerisch berechneten Diffusionskoeffizienten, der gegen den tatsächlichen zeitunabhängigen Wert konvergiert. Im einen Fall handelt es sich um eine Systemeigenschaft, im anderen um eine numerische Schwierigkeit.

2.2.2 Randbedingungen

Um die Erhaltung der Dichte des Systems zu garantieren, muß an den ein- und ausführenden Rändern der Fluß der Dichte verschwinden. Physikalisch interpretiert entspricht dies reflektierenden Wänden. Da der Fluß gemäß den Annahmen proportional dem Gradienten der Dichte ist, bedeutet dies, daß

$$\partial_\psi u(0, t) = \partial_\psi u(\Delta, t) = 0, \quad \psi \in [0; \Delta]$$

ist. Das System ist also auf das Intervall $[0; \Delta]$ eingeschränkt.

Zur Bestimmung der Lösung muß die Dichte im Raum fouriertransformiert werden, weswegen es sinnvoll ist, das System rein formal auf eine periodische und gerade Funktion

$$u(-\psi, t) = u(\psi, t)$$

zu erweitern. Dadurch erweitert sich das Intervall für ψ auf den Bereich $[-\Delta; \Delta]$ und $u(\psi, t)$ kann durch eine reine Kosinusreihe dargestellt werden.

2.2.3 Anfangsbedingung

Da das System keine Translationsinvarianz mehr besitzt, hängt die zeitliche Entwicklung der Anfangsbedingungen von der Startposition der Testteilchen ab. Dies ist leicht zu verstehen, wenn man einmal ein Testteilchen am Rande des Intervalls betrachtet und eins in der Mitte. Das Teilchen in der Mitte benötigt einige Zeit, bis es überhaupt etwas von der Existenz der Wand bemerken kann, während das Teilchen am Rand bereits von Anfang an nur eine mögliche freie Richtung besitzt.

Dieser Effekt ist deutlich in der zeitlichen Entwicklung der Varianz zu erkennen. Eine, von einem kleinen Bereich des Phasenraums gestartete Population von Testteilchen, zeigt eine vom Ort des Startpunktes abhängige zeitliche Entwicklung, die sich von der Entwicklung von anderen Startpunkten aus unterscheidet. Dies ist ein erster wichtiger Unterschied, der auf jeden Fall bei der Analyse solcher Systeme berücksichtigt werden muß.

Im Rahmen des hier untersuchten eindimensionalen Modells starten alle Testteilchen von einer Position aus, womit sich die Dichte

$$u(\psi, 0) = \delta(\psi_0 - \psi) + \delta(\psi_0 + \psi)$$

ergibt, wobei ψ_0 eine frei wählbare Startposition darstellt. Um die geforderte Symmetrie der Dichte zu gewährleisten, muß zu der gewünschten Startposition auch noch die dazugehörige negative besetzt werden.

2.2.4 Fouriertransformation

Wie bei der Diffusion in einem grenzenlosen System läßt sich auch in diesem Fall die Differentialgleichung im Fourierraum lösen. Durch die räumliche Begrenzung ergibt sich jedoch kein Fourierintegral, sondern die diskrete Summe

$$u(\psi, t) = \frac{a_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) \cdot \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right)$$

für die Berechnung der Dichte aus den Fourierkoeffizienten. Diese wiederum sind durch die Rücktransformation mit

$$a_k(t) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta}^{+\Delta} d\psi \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot u(\psi, t)$$

eindeutig bestimmt. Aufgrund der Wahl von $u(\psi, t)$ als gerade Funktion, könnte das Integral auch nur über positive ψ -Werte berechnet werden. In dem Fall muß natürlich dann auch der Vorfaktor verdoppelt werden.

Überprüfung der Randbedingungen

Ersetzt man die Dichte durch ihre Rücktransformation aus dem Fourierraum, so läßt sich direkt zeigen, daß die geforderten Randbedingungen durch die getroffene Wahl der Transformation automatisch erfüllt werden:

$$\begin{aligned} \partial_\psi u(\psi, t) \Big|_{\psi=\pm\Delta, 0} &= \partial_\psi \left[\frac{a_0(t)}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} a_k(t) \cdot \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \right] \Big|_{\psi=\pm\Delta, 0} = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} -a_k(t) \cdot \frac{k \cdot \pi}{\Delta} \cdot \sin\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \Big|_{\psi=\pm\Delta, 0} = 0 \end{aligned}$$

Diese müssen daher nicht mehr separat berücksichtigt werden, sondern sind bereits in der fouriertransformierten Darstellung mit eingebaut. Der entscheidende Punkt ist hierbei, daß sich die Dichte als reine Kosinussumme darstellen läßt. Deshalb auch die Erweiterung der Dichte auf eine gerade und periodische Funktion.

Transformierte Anfangsbedingungen

Neben dem Nachweis, daß die Randbedingungen erfüllt sind, muß nun noch für die spätere explizite Angabe der Lösung, die im Ortsraum gegebene Anfangsbedingung in den Fourierraum transformiert werden. Statt konstanter Koeffizienten, wie im unbegrenzten System, ergibt sich

$$a_k(0) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta}^{+\Delta} d\psi \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot \left(\delta(\psi_0 - \psi) + \delta(\psi_0 + \psi) \right) =$$

$$= \frac{2}{\Delta} \cdot \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi_0}{\Delta}\right)$$

als ein von der Startposition abhängiger Fourierkoeffizient. Man erkennt auch an dieser Stelle deutlich, daß die Position an der man die Testteilchen aussetzt, einen wichtigen Einfluß auf die spätere Lösung ausübt.

2.2.5 Fouriertransformation der Differentialgleichung

Nachdem nun alle nötigen Vorarbeiten abgeschlossen sind, kann die Differentialgleichung im Ortsraum in die transformierte im Fourierraum umgeschrieben werden. Die linke Seite der Differentialgleichung mit der Zeitableitung liefert

$$\frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta}^{+\Delta} d\psi \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot \partial_t u(\psi, t) = \partial_t \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta}^{+\Delta} d\psi \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot u(\psi, t) = \partial_t a_k(t)$$

und als zweiter Schritt folgt nun die etwas aufwendigere Transformation der Ortsableitungen. Dabei fallen die eckigen Klammern bei den partiellen Integrationen einmal aufgrund der Randbedingungen und einmal aufgrund der Verwendung einer reinen Kosinussumme weg.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta}^{+\Delta} d\psi \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot D(t) \cdot \partial_\psi^2 u(\psi, t) &= \\ &= \frac{D(t)}{\Delta} \left[\cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot \partial_\psi u(\psi, t) \right]_{-\Delta}^{+\Delta} + \dots \\ &\quad \dots + \frac{D(t)}{\Delta} \int_{-\Delta}^{+\Delta} d\psi \frac{k \cdot \pi}{\Delta} \cdot \sin\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot \partial_\psi u(\psi, t) = \\ &= \frac{D(t) \cdot k \cdot \pi}{\Delta^2} \left[\sin\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot u(\psi, t) \right]_{-\Delta}^{+\Delta} - \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\ldots - \frac{D(t) \cdot k \cdot \pi}{\Delta^2} \int_{-\Delta}^{+\Delta} d\psi \frac{k \cdot \pi}{\Delta} \cdot \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi}{\Delta}\right) \cdot u(\psi, t) = \\
= -\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot D(t) \cdot a_k(t)
\end{aligned}$$

Setzt man diese Teile wieder zusammen, so ergibt sich die transformierte Differentialgleichung des Systems im Fourierraum:

$$\partial_t a_k(t) = -\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot D(t) \cdot a_k(t)$$

2.2.6 Analytische Lösung

Diese Differentialgleichung lässt sich analytisch lösen. Mit

$$\tilde{D}(t) = \int_0^t dt' D(t')$$

lautet die Lösung der Differentialgleichung im Fourierraum:

$$\begin{aligned}
a_k(t) &= a_k(0) \cdot \exp\left\{-\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot \tilde{D}(t)\right\} = \\
&= \frac{2}{\Delta} \cdot \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi_0}{\Delta}\right) \cdot \exp\left\{-\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot \tilde{D}(t)\right\}
\end{aligned}$$

Hieraus erhält man nach Rücktransformation in den Ortsraum die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned}
u(\psi, t) &= \frac{1}{\Delta} \cdot \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left\{-\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot \tilde{D}(t)\right\} \cdot \ldots \right. \\
&\quad \left. \ldots \cdot \left(\cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot (\psi_0 - \psi)}{\Delta}\right) + \cos\left(\frac{k \cdot \pi \cdot (\psi_0 + \psi)}{\Delta}\right) \right) \right]
\end{aligned}$$

des begrenzten Systems. Durch den Exponentialfaktor konvergiert die Summe über k sehr schnell, selbst wenn $\tilde{D}(t)$ eine kleine Zahl ist. Für den Vergleich dieser Verteilung mit numerisch berechneten Verteilungen benötigt man noch die Verteilungsfunktion $U(\psi, t)$. Auch dieses Integral über die Wahrscheinlichkeitsdichte kann analytisch berechnet werden.

$$\begin{aligned}
 U(\psi, t) &= \int_0^\psi d\psi' u(\psi', t) = \\
 &= \frac{\psi}{\Delta} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k \cdot \pi} \cdot \exp \left\{ -\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot \tilde{D}(t) \right\} \cdot \dots \\
 &\quad \dots \cdot \left(\sin \left(\frac{k \cdot \pi \cdot (\psi_0 + \psi)}{\Delta} \right) - \sin \left(\frac{k \cdot \pi \cdot (\psi_0 - \psi)}{\Delta} \right) \right)
 \end{aligned}$$

Aus dieser analytisch gegebenen Verteilungsfunktion und einer numerisch gewonnenen kann nun mittels eines Kolmogorov-Smirnov-Tests der Korrelationsgrad der beiden Verteilungen bestimmt werden.

2.2.7 Momente der Wahrscheinlichkeitsdichte

Neben der Wahrscheinlichkeitsdichte und der Verteilungsfunktion selber sind auch die statistischen Momente des Systems von Interesse, um sie mit denen eines numerisch berechneten Systems zu vergleichen. Um aber eine Aussage über die Gleichheit des zugrundeliegenden Transportprozesses treffen zu können, ist immer ein Vergleich der Verteilungsfunktionen aussagekräftiger, da verschiedene Verteilungen durchaus ähnliche Momente besitzen können. Manchmal ist jedoch die Berechnung der Verteilungsfunktion numerisch zu aufwendig, so daß man auf einen Vergleich der zeitlichen Entwicklung der verschiedenen statistischen Momente der Verteilung zurückgreifen muß.

Diese lassen sich ebenfalls analytisch berechnen und unter Einführung der Koeffizienten

$$\alpha_k(t) = \frac{1}{\pi^2 \cdot k^2} \cdot \exp \left\{ -\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot \tilde{D}(t) \right\} \cdot \cos \left(\frac{k \cdot \pi \cdot \psi_0}{\Delta} \right)$$

in einer kompakten Form aufschreiben.

Normierung

Durch die Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich für das niedrigste Moment

$$\langle u(\psi, t) \rangle_\psi = \int_0^\Delta d\psi \, u(\psi, t) = 1$$

stets der gewünschte Wert 1 für die Gesamtwahrscheinlichkeit.

Erwartungswert

Der Mittelwert der Verteilung

$$\begin{aligned} \langle \psi \cdot u(\psi, t) \rangle_\psi &= \int_0^\Delta d\psi \, \psi \cdot u(\psi, t) = \frac{\Delta}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} 2 \cdot \Delta \cdot \alpha_k(t) \cdot ((-)^k - 1) = \\ &= \frac{\Delta}{2} - \sum_{n=1}^{\infty} 4 \cdot \Delta \cdot \alpha_{2n-1}(t) \end{aligned}$$

ändert sich dagegen im Laufe der Zeit von der Anfangsposition der Testteilchen zum Mittelwert $\Delta/2$, welcher sich bei einer gleichförmigen Verteilung der Dichte über das gesamte zur Verfügung stehende Intervall ergibt. Bei einem Diffusionsprozeß in einem unbegrenzten System wäre auch dieses Moment zeitlich konstant geblieben. Durch die in endlicher Entfernung liegenden Ränder des Systems entsteht jedoch je nach Startposition anfangs eine Asymmetrie, welche sich erst für lange Zeiten in eine Gleichverteilung über das gesamte Intervall verwandelt.

2. Moment

Zur Berechnung der Varianz, einer mit numerischen Daten leicht vergleichbaren Größe, wird das zweite Moment

$$\langle \psi^2 \cdot u(\psi, t) \rangle_\psi = \int_0^\Delta d\psi \, \psi^2 \cdot u(\psi, t) = \frac{\Delta^2}{3} + \sum_{k=1}^{\infty} 4 \cdot \Delta^2 \cdot \alpha_k(t) \cdot (-)^k$$

der Wahrscheinlichkeitsdichte benötigt. Auch dieses Moment strebt für unendlich lange Zeiten gegen den für eine gleichmäßige Verteilung über das zur Verfügung stehende Intervall zu erwartenden Wert.

Varianz

Neben dem Mittelwert einer Verteilung, welcher eine Aussage über die Position der Verteilung im Intervall beschreibt, ist auch die Varianz von großer Bedeutung, da sie angibt, wie lokalisiert die Testteilchen um die durch den Mittelwert beschriebene Position verteilt sind. Obwohl die Varianz damit nicht direkt vom Anfangsort abhängt, ergibt sich doch eine unterschiedliche Zeitabhängigkeit, da die Testteilchen nahe am Rand eine längere Zeit benötigen, sich über das gesamte Intervall zu verteilen, als Testteilchen aus der Mitte des Intervalls. Aus den bereits berechneten Momenten ergibt sich unmittelbar die Varianz

$$\begin{aligned} \sigma^2(t) &= \langle \psi^2 \cdot u(\psi, t) \rangle_\psi - \left(\langle \psi \cdot u(\psi, t) \rangle_\psi \right)^2 = \\ &= \frac{\Delta^2}{12} + \sum_{n=1}^{\infty} 4 \cdot \Delta^2 \cdot \alpha_{2n}(t) + \left(\sum_{n=1}^{\infty} 4 \cdot \Delta \cdot \alpha_{2n-1}(t) \right)^2 \end{aligned}$$

und auch hier strebt der Grenzwert für lange Zeiten gegen den einer Gleichverteilung über das Intervall. Insbesondere ist dieser Grenzwert unabhängig von der Startposition, weshalb man dadurch bei numerisch berechneten Verteilungen die Größe des verfügbaren Intervalls berechnen kann. Die Mitte des Intervalls ergibt sich aus dem Grenzwert des Erwartungswertes. Damit verbleibt lediglich der Diffusionskoeffizient selber als unbekannte Größe und muß für einen Vergleich passend gewählt werden.

2.3 Konstanter Diffusionskoeffizient

Der sicherlich interessanteste Fall ist der eines konstanten Diffusionskoeffizienten. Insbesondere der Vergleich zwischen einer unbegrenzten Diffusion

mit konstantem Diffusionskoeffizienten und einer begrenzten zeigt auf, wie unterschiedlich beide Systeme sich verhalten können und wie schnell man zu falschen Ergebnissen kommen kann, wenn man ein begrenztes System „näherungsweise“ als unbegrenzt betrachtet. Das Integral

$$\tilde{D}(t) = \int_0^t dt' D = D \cdot t$$

über den Diffusionskoeffizienten ist trivial zu berechnen und liefert zusammen mit der bereits angegebenen analytischen Lösung die vollständige Beschreibung des untersuchten Systems. Sämtliche Momente, die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Verteilungsfunktion können mit exakter Orts- und Zeitabhängigkeit angegeben werden. Somit steht die vollständige Information über das System zum Vergleich mit anderen Systemen zur Verfügung.

2.4 Zeitabhängiger Diffusionskoeffizient

Neben einer Diffusion mit einem konstanten Koeffizienten gibt es auch Systeme, die einen stärkeren (superdiffusiv) oder schwächeren Transport (subdiffusiv) als ein diffusives System zeigen. Für viele dieser Systeme kann gezeigt werden, daß ein solches Verhalten durch einen zeitabhängigen Diffusionskoeffizienten beschrieben werden kann. Oft besteht die Zeitabhängigkeit lediglich in einem einfachen Potenzgesetz. In diesem Fall ergibt sich

$$\tilde{D}(t) = \int_0^t dt' D \cdot t'^\beta = D \cdot \frac{t^{1+\beta}}{1+\beta}$$

als Lösung. Will man nun versuchen numerisch gegebene Daten mit einem solchen System zu vergleichen, so muß neben dem eigentlichen Diffusionskoeffizienten D auch noch der Exponent β bestimmt werden.

2.5 Vershobene Verteilungen

Da man in der Praxis selten ein System finden wird, das genau zwischen den Grenzen 0 und Δ eingesperrt ist, soll hier auch noch der durch eine

Verschiebung entstehende Unterschied untersucht werden. Sei die verschobene Verteilung $v = u + \delta$ gegeben, so ergibt sich für das erste Moment $\langle v \rangle = \langle u \rangle + \delta$ erwartungsgemäß auch nur eine lineare Verschiebung. Die Varianz ist dagegen von einer Verschiebung unabhängig.

$$\sigma^2 = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \langle u^2 \rangle - \langle u \rangle^2$$

Möchte man lediglich die Diffusionskoeffizienten zweier Systeme vergleichen, so braucht man also keine Rücksicht auf eine eventuelle Verschiebungen der beiden Verteilungen zueinander zu berücksichtigen.

2.6 Grenzfall für $\Delta \rightarrow \infty$

Wählt man die Größe des Intervalls für ψ größer und größer, so sollten die hier erhaltenen Formeln in die eines unbegrenzten Systems übergehen. Dies läßt sich beispielhaft an der Wahrscheinlichkeitsdichte zeigen. Die Summe über k wird im Grenzfall eines unendlichen Parameters Δ zu einem Integral, welches sich analytisch lösen läßt und die bekannte Gaußverteilung eines unbegrenzten Systems liefert.

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta \rightarrow \infty} u(\psi, t) &= \\ &= \lim_{\Delta \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\pi}{\Delta} \cdot \exp \left\{ -\frac{k^2 \cdot \pi^2}{\Delta^2} \cdot \tilde{D}(t) \right\} \cdot \dots \\ &\quad \dots \cdot \left(\cos \left(\frac{k \cdot \pi \cdot (\psi_0 - \psi)}{\Delta} \right) + \cos \left(\frac{k \cdot \pi \cdot (\psi_0 + \psi)}{\Delta} \right) \right) = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dx \exp \left\{ -\tilde{D}(t) \cdot x^2 \right\} \cdot \left[\cos \left((\psi_0 - \psi) \cdot x \right) + \cos \left((\psi_0 + \psi) \cdot x \right) \right] = \\ &= \sqrt{\frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \tilde{D}(t)}} \cdot \left(\exp \left\{ -\frac{(\psi - \psi_0)^2}{4 \cdot \tilde{D}(t)} \right\} + \exp \left\{ -\frac{(\psi + \psi_0)^2}{4 \cdot \tilde{D}(t)} \right\} \right) \end{aligned}$$

Kapitel 3

Symplektische Integratoren

Aus einem gegebenen zeitlich kontinuierlichen System eine Abbildung zu konstruieren, ist keine triviale Aufgabe [1, 19]. Eine Möglichkeit besteht darin, eine Abbildung zu „erraten“ und diese durch Vergleich mit dem numerisch integrierten System zu rechtfertigen. Auf diese Weise sind viele bekannte Abbildungen gefunden worden.

In dieser Arbeit soll im Gegensatz dazu der Versuch unternommen werden, ein Verfahren aufzustellen, das eine direkte Ableitung einer Abbildung aus einem kontinuierlichen System erlaubt. Die Idee ist dabei einfach: Man nehme einen hochwertigen numerischen Integrator und mißbrauche ihn als Abbildung, indem man die Schrittweite sehr groß wähle.

Damit diese Methode funktionieren kann, muß der Integrator das untersuchte System möglichst genau beschreiben [11, 57]. Für Hamiltonsche Systeme, auf welche sich dieses Verfahren beschränkt, kann dies durch symplektische Integratoren erreicht werden [56]. Diese approximieren das untersuchte System nicht durch eine Entwicklung der Bewegungsgleichungen in der Zeit (wie dies zum Beispiel bei Runge-Kutta-Verfahren der Fall wäre), sondern approximieren das gewünschte Hamiltonsche System durch ein analytisch exakt gelöstes, welches mit abnehmender Schrittweite gegen das ursprüngliche konvergiert.

Hierdurch werden wesentliche wichtige Eigenschaften des Phasenraums des untersuchten Systems sehr detailliert abgebildet. Die Erhaltung aller Poincaré-Invarianten des ursprünglichen Hamiltonschen Systems ist eine dieser Eigenschaften. Die Trajektorien des „echten“ Systems werden dadurch fast

perfekt getroffen. Der Fehler liegt hauptsächlich in der Geschwindigkeit, mit der die Trajektorie im Phasenraum durchlaufen wird.

Da zum Berechnen von Transportgrößen in einem System über viele Anfangsbedingungen gemittelt wird, ist ein „Phasenfehler“ (also ein Fehler in der Geschwindigkeit, mit der eine Trajektorie durchlaufen wird) weniger kritisch als ein Fehler in der Position der Trajektorie. Solange das Abbild des Phasenraums statistisch korrekt wiedergegeben wird, kann die Schrittweite erhöht werden. Durch die speziellen Eigenschaften symplektischer Integratoren ist dies über einen großen Bereich von Schrittweiten gegeben. Diese Genauigkeit kann jederzeit dadurch überprüft werden, daß die selbe Rechnung mit einer kleineren Schrittweite wiederholt wird. Der Übergang von der Integration zur Abbildung ist fließend.

3.1 Hamiltonsche Systeme

Viele physikalische Systeme lassen sich in der Hamiltonschen Formulierung beschreiben. Daher bedeutet die Einschränkung auf selbige keinen zu großen Verlust an Anwendbarkeit. Auch für in der Plasmaphysik relevante Systeme existieren solche Ansätze.

Der Formalismus zur Ableitung eines symplektischen Integrators für ein solches System wird im folgenden aus der Formulierung der Bewegungsgleichungen mittels Differentialoperatoren gezeigt [62]. Diese Ableitung könnte auch mit Hilfe der Liealgebra durchgeführt werden, wodurch die Schreibweise zwar kompakter, dafür aber auch weniger durchsichtig wäre [27]. Außerdem sei in diesem Zusammenhang auch auf ein Buch [49] über die numerische Lösung Hamiltonscher Systeme verwiesen.

3.1.1 Zeitabhängige Systeme

Da der Formalismus nur auf zeitunabhängige Hamiltonfunktionen anwendbar ist, muß deshalb zuerst dieser allgemeinere Fall behandelt werden. Geht man von einer zeitabhängigen Hamiltonfunktion $H_t(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$ aus, so kann man durch Erweiterung des Phasenraums um ein zusätzliches Paar kanonisch konjugierter Variablen (nämlich t und p_t) eine neue, nun zeitunabhängige, Hamiltonfunktion aufstellen. Dabei ist zu beachten, daß t im neuen System eine

Ortskoordinate im Phasenraum darstellt und nicht mehr die Zeit. Die Zeit im neuen System sei deshalb mit τ bezeichnet.

Das neue System läßt sich sehr einfach aus dem alten berechnen, indem man den neuen Impuls p_t zur ursprünglichen Hamiltonfunktion addiert.

$$H(\mathbf{p}, p_t, \mathbf{q}, t) = H_t(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t) + p_t$$

Als erstes kann man nun verifizieren, daß sich die beiden Zeiten t und τ lediglich um eine Konstante unterscheiden können.

$$\dot{t} = \frac{dt}{d\tau} = \frac{\partial H}{\partial p_t} = 1 \quad \text{woraus folgt, daß} \quad t = \tau + \text{const.}$$

Mit Hilfe dieses Zusammenhangs zwischen beiden Zeitskalen läßt sich nun ebenfalls zeigen, daß auch die Bewegungsgleichungen für die übrigen kanonisch konjugierten Variablen invariant bleiben.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= \frac{d\mathbf{p}}{d\tau} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot \frac{dt}{d\tau} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad \text{und somit} \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \quad \text{sowie} \\ \dot{\mathbf{q}} &= \frac{d\mathbf{q}}{d\tau} = \frac{d\mathbf{q}}{dt} \cdot \frac{dt}{d\tau} = \frac{d\mathbf{q}}{dt} \quad \text{und} \quad \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \end{aligned}$$

Durch die Umformung ist das zeitabhängige in ein zeitunabhängiges System transformiert worden. Wir können deshalb für die weitere Herleitung ohne Beschränkung der Allgemeinheit von einer zeitunabhängigen Hamiltonfunktion ausgehen.

3.1.2 Zeitunabhängige Systeme

Tritt die Zeit in der untersuchten Hamiltonfunktion nicht explizit auf, so ist der Wert der Hamiltonfunktion konstant. Die Gesamtenergie des Systems stellt also eine Erhaltungsgröße dar. Diese kann somit als Kontrollgröße verwendet werden, um die Genauigkeit der verwendeten numerischen Näherungen abzuschätzen.

Ausgehend von der Hamiltonfunktion $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ und den bekannten dazu gehörenden Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \quad \text{und} \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}$$

definieren wir die Poissonklammer in üblicher Weise

$$\{F, G\} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial G}{\partial \mathbf{q}}$$

und fassen damit die Bewegungsgleichungen für $\mathbf{p}$ und $\mathbf{q}$ zu einer einzigen für $\mathbf{z} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ zusammen:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}} &= \left(-\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \right) = \left(\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \right) = \\ &= (\{\mathbf{p}, H\}, \{\mathbf{q}, H\}) = \{(\mathbf{p}, \mathbf{q}), H\} \end{aligned}$$

Damit erhält man eine sehr kompakte und für Orte und Impulse einheitliche Schreibweise der Bewegungsgleichungen:

$$\dot{\mathbf{z}} = \{\mathbf{z}, H\}$$

Diese kann man durch die Einführung des Differentialoperators D_G

$$D_G \cdot F = \{F, G\}$$

in die folgende Form umschreiben

$$\dot{\mathbf{z}} = D_H \cdot \mathbf{z} ,$$

welche im weiteren für die Ableitung benötigt wird.

3.1.3 Formale Lösung

Die soeben aufgestellte Differentialgleichung läßt sich formal durch

$$\mathbf{z}(t) = \exp \{t \cdot D_H\} \cdot \mathbf{z}(0)$$

lösen, wobei die Tatsache benötigt wird, daß H eine Erhaltungsgröße des Systems ist und damit D_H formal zeitunabhängig [27]. Dies ist der Grund für die anfangs beschriebene Notwendigkeit der Transformation auf zeitunabhängige Systeme.

3.2 Genäherte Lösungen

Die weiteren Formeln für die Ableitung von Integratoren beruhen nun darauf, den Differentialoperator D_H als Summe aus Differentialoperatoren zu schreiben und dann die Summe in der Exponentialfunktion durch ein Produkt aus Exponentialfunktionen anzunähern. Die einzelnen Produktterme werden dabei so gewählt, daß sie analytisch lösbare Einzelsysteme darstellen. Der Integrator besteht also aus einer geschickten Hintereinanderreihung von analytischen Lösungen einfacherer Hamiltonscher Systeme.

3.2.1 Näherung für Summen

Ein große Anzahl von Hamiltonschen Systemen läßt sich in Summen aus Hamiltonfunktionen aufspalten, die jede für sich genommen analytisch integrierbar sind. Als ein Beispiel seien Hamiltonfunktion des Typs

$$H(\mathbf{z}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$$

erwähnt. Spaltet man diese Systeme in kinetischen und potentiellen Anteil auf, so erhält man zwei Einzelsysteme, die jedes für sich gesehen trivial integrierbar sind, weil jeweils nur eine der beiden kanonisch konjugierten Variablen vorkommt.

Natürlich ist eine solche Aufspaltung nicht auf zwei Summanden begrenzt, sondern kann von der allgemeinen Form

$$H(\mathbf{z}) = H_1(\mathbf{z}) + H_2(\mathbf{z}) + \dots = \sum_i H_i(\mathbf{z})$$

sein. Setzt man dies in die Bewegungsgleichungen ein, so ergibt sich aufgrund der Linearität der Poissonklammer ebenfalls eine Summe

$$D_H \cdot \mathbf{z} = \{\mathbf{z}, H\} = \{\mathbf{z}, \sum_i H_i\} = \sum_i \{\mathbf{z}, H_i\} = \sum_i D_{H_i} \cdot \mathbf{z}$$

über die einzelnen, den „Unter“-Hamiltonfunktionen zugeordneten Operatoren. Die formale Lösung

$$\mathbf{z}(t) = \exp \left\{ t \cdot \sum_i D_{H_i} \right\} \cdot \mathbf{z}(0)$$

bildet nun die Grundlage, auf der eine näherungsweise Lösung des Systems berechnet werden kann. Da es sich bei den D_{H_i} um Differentialoperatoren handelt, kann die Summe im Exponenten nicht einfach in ein Produkt aus Exponentialfunktionen umgewandelt werden.

Dies wäre wünschenswert, da $H(\mathbf{z})$ ja gerade in einer Weise aufgeteilt wurde, daß die Bewegungsgleichungen für alle $H_i(\mathbf{z})$ analytisch gelöst werden können. Mit anderen Worten ist die Lösung

$$\mathbf{z}(t) = \exp \{ t \cdot D_{H_i} \} \cdot \mathbf{z}(0)$$

für jedes Teilsystem bekannt. Die Kunst besteht nun darin die exakte Form mit einer Summe über alle Teilsysteme im Exponenten, möglichst gut durch eine Form zu approximieren, die lediglich aus Produkten von Exponentialfunktionen mit einzelnen Teilsystemen im Exponenten besteht.

Eine mögliche Lösung [27] ist, mit der Hälfte der Schrittweite die Integratoren der Einzelsysteme auf die Anfangsbedingungen anzuwenden und danach noch einmal dasselbe in umgekehrter Reihenfolge durchzuführen. Diese Lösung

$$\mathbf{z}(t) = S_2(t) \cdot \mathbf{z}(0) + \mathcal{O}(t^3) =$$

$$= \left[\prod_{i=1}^N \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot D_{H_i} \right\} \right] \cdot \left[\prod_{i=N}^1 \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot D_{H_i} \right\} \right] \cdot \mathbf{z}(0) + \mathcal{O}(t^3)$$

stellt einen symplektischen Integrator zweiter Ordnung $S_2(t)$ dar. Mit der Bezeichnung $\mathcal{O}(t^n)$ ist dabei keine Ordnungsangabe im Sinne einer Taylorentwicklung gemeint, sondern bis zu welcher Ordnung in t die Kommutatoren der einzelnen Differentialoperatoren eliminiert wurden.

Die Korrektheit dieser Lösung für zwei Teilsysteme läßt sich leicht mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$\begin{aligned} \exp\{X\} \cdot \exp\{Y\} &= \\ &= \exp \left\{ X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, X, Y] + [Y, Y, X]) + \dots \right\} \end{aligned}$$

$$\text{mit } [X, Y] = X \cdot Y - Y \cdot X, \quad [X, X, Y] = [X, [X, Y]], \quad \dots$$

zeigen. Dabei werden alle Terme von dritter und höherer Ordnung in t vernachlässigt. Durch die gewählte Reihenfolge der Anordnung der einzelnen Differentialoperatoren heben sich die Kommutatoren von zweiter Ordnung in t gegeneinander auf.

$$\begin{aligned} \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot B \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot B \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A \right\} &= \\ &= \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A \right\} \cdot \exp \left\{ t \cdot B \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A \right\} = \\ &= \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A \right\} \cdot \exp \left\{ t \cdot B + \frac{t}{2} \cdot A + \frac{t^2}{4}[B, A] \right\} + \mathcal{O}(t^3) = \\ &= \exp \left\{ t \cdot (A + B) + \frac{t^2}{4}[B, A] + \frac{1}{2} \left[\frac{t}{2} \cdot A, t \cdot B + \frac{t}{2} \cdot A \right] \right\} + \mathcal{O}(t^3) = \\ &= \exp \left\{ t \cdot (A + B) + \frac{t^2}{4}[B, A] + \frac{t^2}{4}[A, B] + \frac{t^2}{8}[A, A] \right\} + \mathcal{O}(t^3) = \\ &= \exp \left\{ t \cdot (A + B) \right\} + \mathcal{O}(t^3) \end{aligned}$$

Aus dieser Form kann man nun durch vollständige Induktion auf eine beliebige Anzahl Teilsysteme schließen. Die obige Form stellt dabei den Rekursionsanfang dar. Zusätzlich setzen wir voraus, daß die Formel

$$\exp \left\{ t \cdot \sum_{i=2}^N A_i \right\} = \prod_{i=2}^N \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} \cdot \prod_{i=N}^2 \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} + \mathcal{O}(t^3)$$

für $N - 1$ Teilsysteme gilt und schließen daraus auf N .

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^N \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} \cdot \prod_{i=N}^1 \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} &= \\ &= \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_1 \right\} \cdot \prod_{i=2}^N \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} \cdot \prod_{i=N}^2 \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_1 \right\} = \\ &= \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_1 \right\} \cdot \exp \left\{ t \cdot \sum_{i=2}^N A_i \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_1 \right\} + \mathcal{O}(t^3) = \\ &= \exp \left\{ t \cdot \sum_{i=1}^N A_i \right\} + \mathcal{O}(t^3) \end{aligned}$$

Damit erhalten wir das gewünschte Endergebnis

$$\prod_{i=1}^N \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} \cdot \prod_{i=N}^1 \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot A_i \right\} = \exp \left\{ t \cdot \sum_{i=1}^N A_i \right\} + \mathcal{O}(t^3)$$

und den Beweis für die Korrektheit der Form für den bereits angegebenen symplektischen Integrator zweiter Ordnung. Interessanterweise kann nun aus dem Integrator zweiter Ordnung, ein Integrator vierter Ordnung gewonnen werden, und aus diesem wiederum ein Integrator sechster Ordnung und so weiter.

Die Rekursionsformel

$$S_{2n+2}(t) = S_{2n}(\lambda_1 \cdot t) \cdot S_{2n}(\lambda_0 \cdot t) \cdot S_{2n}(\lambda_1 \cdot t)$$

$$\text{mit } \lambda_0 = -\frac{2^{1/(2n+1)}}{2 - 2^{1/(2n+1)}} \quad \text{und} \quad \lambda_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/(2n+1)}}$$

ist dabei wiederum sehr ähnlich der Form für den Integrator zweiter Ordnung aufgebaut. Jedoch sind die Größen der Zeitschritte diesmal anders gewählt. Sie ergeben sich aus den Bedingungen

$$\lambda_0 + 2 \cdot \lambda_1 = 1 \quad \text{und} \quad \lambda_0^{2n+1} + 2 \cdot \lambda_1^{2n+1} = 0 ,$$

welche sich wiederum aus der Gesamtlänge eines Zeitschritts und den Vorfaktoren der einzelnen Kommutatoren höherer Ordnungen in t herleiten. Der Beweis hierfür findet sich in [62].

Beispiel Physikalisches Pendel

Zur Veranschaulichung der Methode und ihrer Leistungsfähigkeit eignet sich sehr gut das Physikalische Pendel. Der kritische Teil des Phasenraums dieses Systems sind Trajektorien nahe der Separatrix. Die Qualität eines Integrators läßt sich also darin messen, wie dicht die Anfangsbedingungen an der Separatrix gewählt werden können, ohne daß ein unphysikalisches Verhalten auftritt.

Abbildung 3.1 zeigt schematisch die Problematik. Je nach gewählter Anfangsbedingung schwingt das Pendel entweder durch oder es pendelt zwischen seinen zwei Umkehrpunkten. Ein Wechsel zwischen diesen beiden getrennten Bereichen des Phasenraums ist nicht möglich. Ein guter Integrator sollte also ebenfalls diese Eigenschaft besitzen und nicht die Separatrix überqueren, wie dies in der Abbildung gezeigt ist.

Dies klingt trivial, ist aber ein ernsthaftes numerisches Problem. Verwendet man zum Beispiel ein Runge-Kutta-Verfahren zur Integration, so muß man die Anfangsbedingungen mehrere Größenordnungen weiter entfernt von der Separatrix wählen, als bei dem hier nun beispielhaft abgeleiteten symplektischen Integrator [22, 65]. Da die Periodendauer bei Annäherung an die Separatrix gegen ∞ geht, ist somit auch das Verhältnis zwischen der maximalen, mit einem Integrator erreichten, Periodendauer und der harmonischen, für kleine Schwingungen genäherten, eine direkte Anzeige der Qualität des Integrators. Für den hier abgeleiteten Integrator beträgt das Verhältnis ≈ 4.4 .

Um nun die Gleichungen für den Integrator aufzustellen, muß die Hamiltonfunktion für das physikalische Pendel

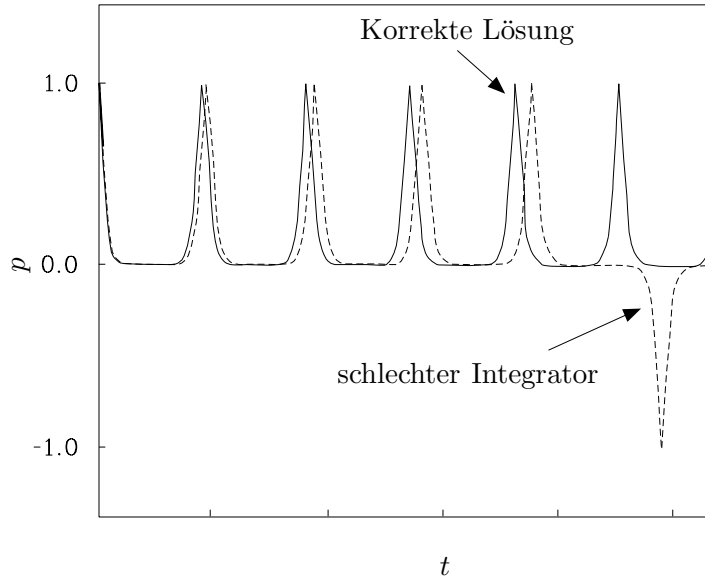


Abbildung 3.1: Vergleich von korrekter Lösung und schlechtem Integrationsverfahren [22]

$$H = H_1 + H_2, \quad H_1 = \frac{p^2}{2}, \quad H_2 = -k \cdot \cos(q) \quad \text{und} \quad k = \frac{1}{4}$$

zuerst in integrable Anteile aufgespalten werden. Es bietet sich bei diesem Problem an, in den kinetischen und in den potentiellen Anteil aufzuspalten. Nun muß für beide Untersysteme die analytische Lösung bestimmt werden, was bei dieser Aufteilung natürlich trivial ist. Für das erste Teilsystem H_1 erhält man die Bewegungsgleichungen

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_1}{\partial q} = 0 \quad \text{und} \quad \dot{q} = \frac{\partial H_1}{\partial p} = p$$

mit der Lösung

$$p(t) = p(0) \quad \text{und} \quad q(t) = q(0) + t \cdot p(0)$$

und für H_2 analog

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_2}{\partial q} = -k \cdot \sin(q) \quad \text{und} \quad \dot{q} = \frac{\partial H_2}{\partial p} = 0$$

als Bewegungsgleichung mit

$$p(t) = p(0) - k \cdot t \cdot \sin(q(0)) \quad \text{und} \quad q(t) = q(0)$$

als Lösung. Aus diesen analytischen Lösungen der Teilsysteme baut man nun den symplektischen Integrator nach der hergeleiteten Näherungsformel

$$S_2(\Delta t) = \exp\left(\frac{\Delta t}{2} \cdot D_{H_1}\right) \cdot \exp\left(\Delta t \cdot D_{H_2}\right) \cdot \exp\left(\frac{\Delta t}{2} \cdot D_{H_1}\right)$$

zusammen und erhält

$$\begin{aligned} p(t) &= p(0) - t \cdot k \cdot \sin\left(q(0) + \frac{t}{2} \cdot p(0)\right) \quad \text{und} \\ q(t) &= q(0) + t \cdot p(0) - \frac{t^2}{2} \cdot k \cdot \sin\left(q(0) + \frac{t}{2} \cdot p(0)\right) \end{aligned}$$

als Formeln für die numerische Integration des Systems, um es von der Zeit 0 zur Zeit t zu integrieren, wobei t die Größe des Zeitschrittes der Integration ist. Zum Vergleich kann man nun noch das System in harmonischer Näherung

$$H = \frac{p^2}{2} - k \cdot \cos(q) \approx \frac{p^2}{2} - k + k \cdot \frac{q^2}{2}$$

lösen und erhält

$$q(t) = \cos\left(\sqrt{k} \cdot t\right)$$

als Lösung und damit

$$T = \frac{2 \cdot \pi}{\sqrt{k}} = 4 \cdot \pi \approx 12.57$$

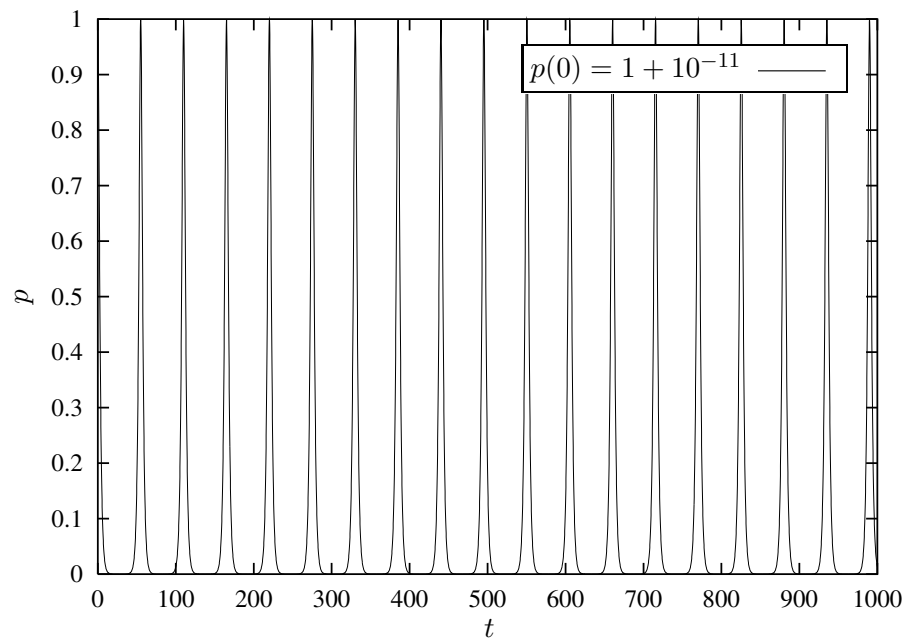


Abbildung 3.2: Langzeitverhalten einer Trajektorie nahe der Separatrix

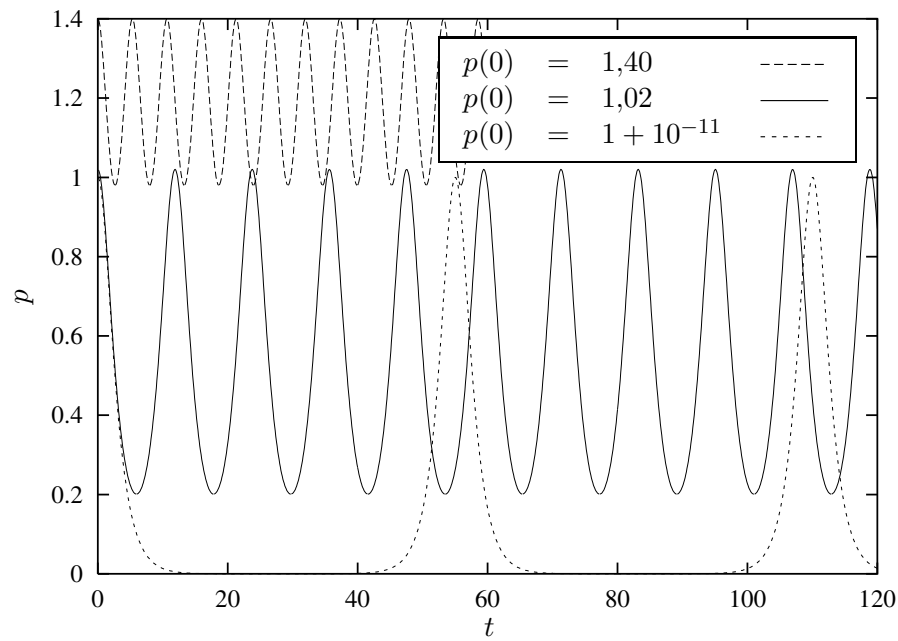


Abbildung 3.3: Trajektorien eines durchschwingenden Pendels

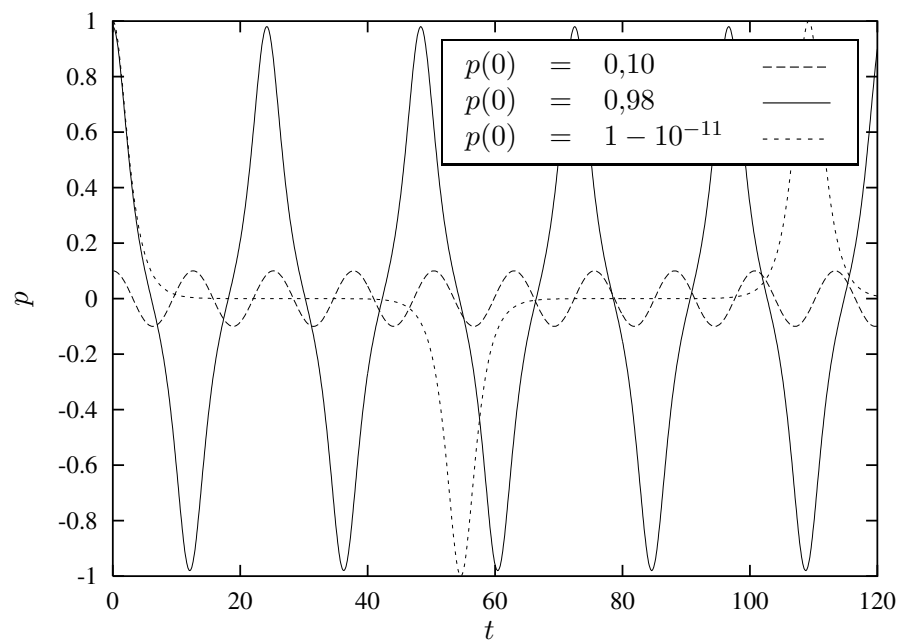


Abbildung 3.4: Trajektorien eines umkehrenden Pendels

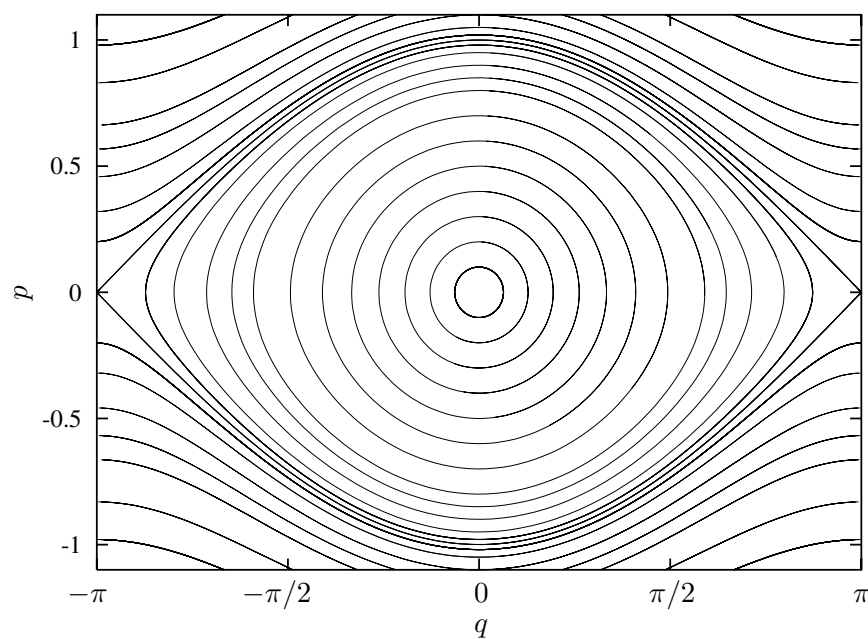


Abbildung 3.5: Darstellung des Phasenraums

als Periodendauer des Systems für kleine Auslenkung um die stabile Ruhelage. Die Abbildungen 3.2, 3.3 und 3.4 zeigen das Ergebnis der Integration mit diesem Integrator für verschiedene Anfangsbedingungen und Abbildung 3.5 zeigt einen berechneten Phasenraumplot mit zusätzlichen Anfangsbedingungen. Dabei ist anzumerken, daß die Separatrix aus zwei überlagerten und mit dem Auge nicht mehr zu trennenden Anfangsbedingungen entstanden ist, nämlich $p = 1 - 10^{-11}$ und $p = 1 + 10^{-11}$. Trotz dieser optisch nicht mehr zu trennenden Distanz liegen beide Trajektorien in verschiedenen Bereichen des Phasenraums und verweilen dort auch für alle Zeiten. Daran kann man deutlich erkennen, wie gut der symplektische Integrator die Struktur des Phasenraums des tatsächlichen Systems abbildet.

3.2.2 Bedeutung des Kommutators

Um ein Gefühl für den bei dieser Form der numerischen Näherung gemachten Fehler zu bekommen, ist es wichtig, die Rolle des Kommutators genauer zu untersuchen. Sowie bei einem klassischen Integrationsverfahren die Restglieder der Taylorentwicklung der Bewegungsgleichungen nach der Zeit Ordnung für Ordnung eliminiert werden, um zu höheren Ordnungen im Integrator zu gelangen, so macht man dies analog bei symplektischen Integratoren mit den Kommutatoren der einzelnen Differentialoperatoren. Die interessante Frage ist dabei, welche physikalische Interpretation einem solchen Kommutator entspricht. Zuerst läßt sich zeigen, daß der Kommutator ebenfalls wieder einem Differentialoperator entspricht.

$$\begin{aligned}
[D_{H_1}, D_{H_2}] \cdot z &= \\
&= (D_{H_1} \cdot D_{H_2} - D_{H_2} \cdot D_{H_1}) \cdot z = \\
&= \{\{z, H_2\}, H_1\} - \{\{z, H_1\}, H_2\} = \\
&= \{z_q \cdot H_p^{(2)} - z_p \cdot H_q^{(2)}, H_1\} - \{z_q \cdot H_p^{(1)} - z_p \cdot H_q^{(1)}, H_2\} = \\
&= [z_{qq} \cdot H_p^{(2)} + z_q \cdot H_{pq}^{(2)} - z_{pq} \cdot H_q^{(2)} - z_p \cdot H_{qq}^{(2)}] \cdot H_p^{(1)} - \dots \\
&\quad \dots - [z_{pq} \cdot H_p^{(2)} + z_q \cdot H_{pp}^{(2)} - z_{pp} \cdot H_q^{(2)} - z_p \cdot H_{pq}^{(2)}] \cdot H_q^{(1)} - \dots \\
&\quad \dots - [z_{qq} \cdot H_p^{(1)} + z_q \cdot H_{pq}^{(1)} - z_{pq} \cdot H_q^{(1)} - z_p \cdot H_{qq}^{(1)}] \cdot H_p^{(2)} + \dots \\
&\quad \dots + [z_{pq} \cdot H_p^{(1)} + z_q \cdot H_{pp}^{(1)} - z_{pp} \cdot H_q^{(1)} - z_p \cdot H_{pq}^{(1)}] \cdot H_q^{(2)} = \\
&= z_q \cdot [H_{pq}^{(2)} \cdot H_p^{(1)} - H_{pp}^{(2)} \cdot H_q^{(1)} - H_{pq}^{(1)} \cdot H_p^{(2)} + H_{pp}^{(1)} \cdot H_q^{(2)}] - \dots \\
&\quad \dots - z_p \cdot [H_{qq}^{(2)} \cdot H_p^{(1)} - H_{pq}^{(2)} \cdot H_q^{(1)} - H_{qq}^{(1)} \cdot H_p^{(2)} + H_{pq}^{(1)} \cdot H_q^{(2)}] =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= z_q \cdot \left[\left(H_p^{(1)} \cdot H_q^{(2)} \right)_p - \left(H_p^{(2)} \cdot H_q^{(1)} \right)_p \right] - \dots \\
&\quad \dots - z_p \cdot \left[\left(H_p^{(1)} \cdot H_q^{(2)} \right)_q - \left(H_p^{(2)} \cdot H_q^{(1)} \right)_q \right] = \\
&= z_q \cdot \left[H_q^{(2)} \cdot H_p^{(1)} - H_p^{(2)} \cdot H_q^{(1)} \right]_p - \dots \\
&\quad \dots - z_p \cdot \left[H_q^{(2)} \cdot H_p^{(1)} - H_p^{(2)} \cdot H_q^{(1)} \right]_q = \\
&= z_q \cdot \{H_2, H_1\}_p - z_p \cdot \{H_2, H_1\}_q = \{z, \{H_1, H_2\}\} = D_{\{H_2, H_1\}} \cdot z
\end{aligned}$$

Nun kann man noch die Tatsache ausnutzen, daß die Poissonklammer einer Hamiltonfunktion mit sich selber verschwindet und damit das Ergebnis

$$\begin{aligned}
\{H_2, H_1\} &= \{H_2, H_1 + H_2\} = \{H_2, H\} = H_q^{(2)} \cdot H_p - H_p^{(2)} \cdot H_q = \\
&= H_q^{(2)} \cdot \dot{q} + H_p^{(2)} \cdot \dot{p} = H_q^{(2)} \cdot \dot{q} + H_p^{(2)} \cdot \dot{p} + H_t^{(2)} = \frac{d}{dt} H_2 = \dot{H}_2
\end{aligned}$$

erhalten, welches zeigt, daß der Kommutator

$$[D_{H_1}, D_{H_2}] = D_{\{H_2, H_1\}} = D_{\dot{H}_2} = D_{-\dot{H}_1}$$

eng mit dem Energieübertrag zwischen den jeweiligen Teilsystemen verknüpft ist. Dies bestätigt, daß der Fehler bei der Integration praktisch ausschließlich ein Phasenfehler ist. Trägt man den Wert der Gesamthamiltonfunktion auf, so erkennt man für größere Schrittweiten immer stärkere Oszillationen in der Gesamtenergie des Systems. Diese Oszillationen nehmen ebenfalls, wie nicht anders zu erwarten, stark mit der Ordnung des Integrators ab. Aufgrund der physikalischen Bedeutung des Kommutators ist daher die Gesamtenergie des Systems ein guter Kontrollparameter für die Integration, da er praktisch direkt die Größe des Integrationsfehlers anzeigt.

3.2.3 Näherung für Produkte

Bereits die Unterteilung einer Hamiltonfunktion in Summanden macht eine Vielzahl von Systemen diesem Formalismus zugänglich. Jedoch ist dies nicht immer möglich (insbesondere nicht bei den in dieser Arbeit interessierenden

Systemen aus der Plasmaphysik), weshalb es nötig ist, den Formalismus auch auf Produkte aus Untersystemen zu erweitern. Dies geschieht analog zur vorherigen Herleitung. Ausgehend von der Hamiltonfunktion

$$H = H_1 \cdot H_2$$

setzt man die Definition des Differentialoperators ein und erhält mit

$$\begin{aligned} D_H \cdot F &= \{F, H\} = \{F, H_1 \cdot H_2\} = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial(H_1 \cdot H_2)}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial(H_1 \cdot H_2)}{\partial \mathbf{q}} = \\ &= H_1 \left[\frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial H_2}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial H_2}{\partial \mathbf{q}} \right] + H_2 \left[\frac{\partial F}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial H_1}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial F}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial H_1}{\partial \mathbf{q}} \right] = \\ &= H_1 \cdot D_{H_2} \cdot F + H_2 \cdot D_{H_1} \cdot F \end{aligned}$$

eine ähnliche Form wie für Summen aus Hamiltonfunktionen. Damit lassen sich alle bisher beschriebenen Methoden auch auf Produkte von Hamiltonfunktionen übertragen. Ausgehend von dem soeben gefundenen Zusammenhang

$$D_{H_1 \cdot H_2} = H_1 \cdot D_{H_2} + H_2 \cdot D_{H_1}$$

kann aus der formalen Lösung der Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{z}(t) &= \exp \{t \cdot D_H\} \cdot \mathbf{z}(0) = \exp \{t \cdot (H_1 \cdot D_{H_2} + H_2 \cdot D_{H_1})\} \cdot \mathbf{z}(0) = \\ &= \exp \left\{ \frac{H \cdot t}{H_2} \cdot D_{H_2} + \frac{H \cdot t}{H_1} \cdot D_{H_1} \right\} \cdot \mathbf{z}(0) \end{aligned}$$

die genäherte Lösung

$$\mathbf{z}(t) \approx \exp \left\{ \frac{H \cdot t}{2 \cdot H_1} \cdot D_{H_1} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H \cdot t}{H_2} \cdot D_{H_2} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H \cdot t}{2 \cdot H_1} \cdot D_{H_1} \right\} \cdot \mathbf{z}(0)$$

des Problems analog der für Summen angegeben werden. Das Ergebnis für das Produkt zweier Hamiltonfunktionen kann sehr einfach auch auf eine Form für das Produkt von N Hamiltonfunktionen

$$H = \prod_{i=1}^N H_i$$

erweitert werden und man erhält

$$z(t) \approx \left[\prod_{i=1}^N \exp \left\{ \frac{H \cdot t}{2 \cdot H_i} \cdot D_{H_i} \right\} \right] \cdot \left[\prod_{i=N}^1 \exp \left\{ \frac{H \cdot t}{2 \cdot H_i} \cdot D_{H_i} \right\} \right] \cdot z(0)$$

in völliger Analogie zur Form für Summen von Teilsystemen.

Der entscheidende Unterschied zwischen den Formen für Summen und Produkte besteht darin, daß die Größe der eingesetzten Zeitschritte für Produkte nicht mehr unabhängig vom System durch feste Koeffizienten beschrieben wird, sondern im Verhältnis der Einzelenergien der Untersysteme gewichtet werden muß.

Dies hat eine Reihe von Konsequenzen für die Qualität des resultierenden Integrators. Die gravierendste ist, daß die Kommutatoren nicht mehr exakt gegeneinander eliminiert werden, da sich der Wert der Koeffizienten während eines Integrationsschrittes langsam ändert. Dies bricht die für Summen aus Hamiltonfunktionen vorhandene Zeitumkehrinvarianz. Der Integrationsschritt bleibt aber trotzdem symplektisch, da ja weiterhin die analytischen Lösungen der Teilsysteme verwendet werden, lediglich die Größe der verwendeten Zeitschritte wird modifiziert.

Eine weiteres Problem ist, daß der Fall, in dem alle Energie aus einem Teilsystem abgezogen wird, berücksichtigt werden muß. Dies ist nicht schwierig, da in diesem Fall das entsprechende System quasi aus der Hamiltonfunktion verschwindet. Bei allen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten numerischen Berechnungen haben sich diese Komplikationen als unbedeutend erwiesen, jedoch bedarf es sicher noch vieler weiterer Untersuchungen, um ein umfassendes Verständnis dieser Probleme zu erreichen.

Beispiel

An einem einfachen analytisch vollständig lösbaren System soll auch diese Methode demonstriert werden. Das Hamiltonsche System

$$H = H_1 \cdot H_2, \quad H_1 = p, \quad H_2 = q$$

besitzt die Bewegungsgleichungen

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -p \quad \text{und} \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = q$$

und die Lösung

$$p(t) = p(0) \cdot \exp\{-t\} \quad \text{und} \quad q(t) = q(0) \cdot \exp\{t\}$$

mit exponentiell ansteigendem Ort und exponentiell abfallendem Impuls. Um die Qualität der Näherung zu prüfen, betrachten wir die Hamiltonfunktion als Produkt aus zwei Untersystemen und berechnen den dazugehörigen symplektischen Integrator.

Zuerst betrachtet man die Bewegungsgleichungen

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_1}{\partial q} = 0 \quad \text{und} \quad \dot{q} = \frac{\partial H_1}{\partial p} = 1$$

für H_1 mit der Lösung

$$p(t) = p(0) \quad \text{und} \quad q(t) = q(0) + t$$

und danach die für H_2

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_2}{\partial q} = -1 \quad \text{und} \quad \dot{q} = \frac{\partial H_2}{\partial p} = 0$$

mit der Lösung

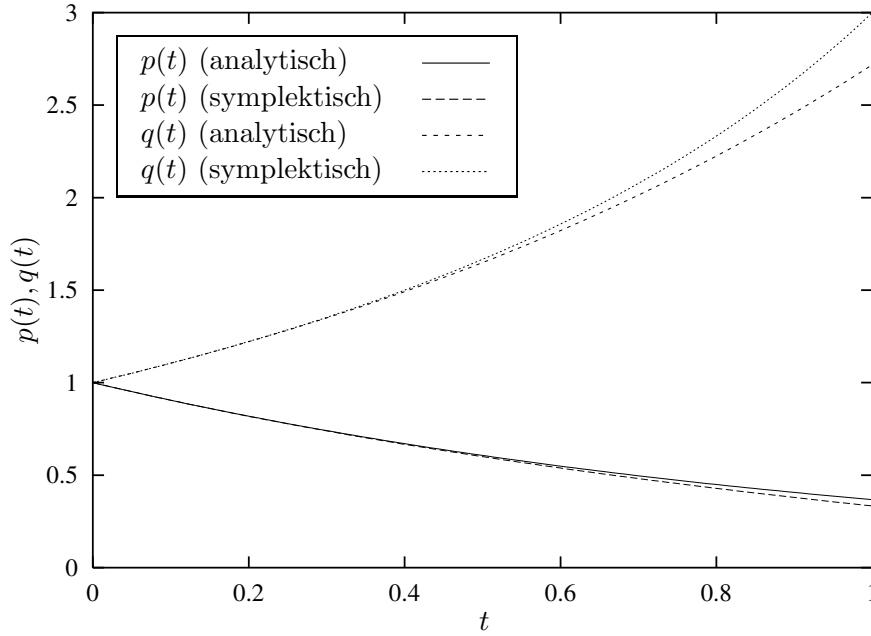


Abbildung 3.6: Vergleich der analytischen Lösung mit dem symplektischen Integrator in Abhängigkeit der Schrittweite

$$p(t) = p(0) - t \quad \text{und} \quad q(t) = q(0) .$$

Gemäß der aufgestellten Näherungsformel

$$S_2(\Delta t) = \exp \left\{ \frac{H \cdot \Delta t}{2 \cdot H_1} \cdot D_{H_1} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H \cdot \Delta t}{H_2} \cdot D_{H_2} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H \cdot \Delta t}{2 \cdot H_1} \cdot D_{H_1} \right\}$$

ergibt sich der symplektische Integrator

$$p(t) = p(0) \cdot \frac{2-t}{2+t} \quad \text{und} \quad q(t) = q(0) \cdot \frac{2+t}{2-t}$$

als Näherung für das betrachtete System. Da die analytische Lösung des Problems bekannt ist, kann man direkt vergleichen, wie gut der symplektische Integrator die korrekte Lösung beschreibt (Abbildung 3.6). Erwähnenswert ist in diesem Zusammenhang noch, daß die Gesamtenergie des Systems exakt

erhalten bleibt, wie sich durch einfaches Einsetzen der Formel in die Hamiltonfunktion verifizieren läßt.

$$H = p(t) \cdot q(t) = p(0) \cdot q(0)$$

3.2.4 Verallgemeinerung für Summen und Produkte

Genauso wie man eine Form für eine Summe oder ein Produkt von Hamiltonfunktionen ableiten kann, ist es auch möglich dies für eine Hamiltonfunktion zu tun, die aus einer Mischung von Summen und Produkten besteht.

Beispielsweise läßt sich sehr einfach für die Hamiltonfunktion

$$H = H_1 + H_2 \cdot H_3, \quad H_{23} = H_2 \cdot H_3$$

der Differentialoperator

$$D_H \cdot F = \{F, H_1 + H_2 \cdot H_3\} = \{F, H_1\} + H_{23} \left(\frac{1}{H_2} \{F, H_2\} + \frac{1}{H_3} \{F, H_3\} \right)$$

in seine Bestandteile zerlegen und aus der erhaltenen Form

$$D_H = D_{H_1} + H_{23} \left(\frac{1}{H_2} D_{H_2} + \frac{1}{H_3} D_{H_3} \right)$$

die genäherte Lösung

$$\begin{aligned} \mathbf{z}(t) \approx \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot D_{H_1} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H_{23} \cdot t}{2 \cdot H_2} \cdot D_{H_2} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H_{23} \cdot t}{H_3} \cdot D_{H_3} \right\} \cdot \dots \\ \dots \cdot \exp \left\{ \frac{H_{23} \cdot t}{2 \cdot H_2} \cdot D_{H_2} \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{t}{2} \cdot D_{H_1} \right\} \cdot \mathbf{z}(0) \end{aligned}$$

für das gegebene System ermitteln. Die hier beispielhaft vorgestellte Hamiltonfunktion entspricht der Struktur nach den im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Systemen in der Plasmaphysik. Der abgeleitete Integrator wurde für die numerische Berechnung dieser Systeme erfolgreich eingesetzt.

Kapitel 4

Tokamap

Um die bekannten Schwächen der Standardabbildung [10, 20, 42, 43] zu umgehen, wurde von Balescu eine verbesserte Abbildung vorgeschlagen [6]. Dieser Abbildung liegt ein „gekicktes“ Hamiltonsches Modellsystem zugrunde. Das System besteht aus einem integrablen Anteil und einer nur zu diskreten Zeiten wirksamen Störung. Daher ist dieses System ein interessanter Test für die Leistungsfähigkeit symplektischer Integratoren, da eine δ -Funktion numerisch genähert werden muß.

Weiterhin besteht die Möglichkeit, die Lokalisierung der Störung bei der numerischen Berechnung in eine breitere Verteilung übergehen zu lassen. Dadurch läßt sich beurteilen, wie gut eine solche „mathematisch künstliche“ Störung eine wirkliche, in der Zeit verteilt wirkende, annähern kann. Letztendlich kann erst ein solcher Vergleich die Benutzung lokalisierter Störungen in der Ableitung von Abbildungen rechtfertigen.

4.1 Korrespondierende Hamiltonfunktion

Um, im Vergleich zur Standardabbildung, zu einer realistischeren Beschreibung von Transportmechanismen in einem toroidalen Magnetfeld zu gelangen, müssen einige wichtige topologische Eigenschaften eines solchen Feldes berücksichtigt werden. Die Hamiltonfunktion

$$H = \int_{\psi}^{\psi} d\psi' W(\psi') - \frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A \cdot \psi}{1 + A \cdot \psi} \cdot \cos(2\pi \cdot \theta) \cdot f(t)$$

besteht aus einem integrierbaren Anteil $W(\psi)$, der ein frei wählbares q-Profil erlaubt, und einer nichtlinearen und nichtintegrierbaren Störung. Diese Störung ist so gewählt, daß die magnetische Achse $\psi = 0$ invariant bleibt. Dies ist physikalisch nötig, da im ungestörten System $\psi \sim r^2$ ist und damit keine negativen Werte für ψ auftreten dürfen [6]. Dies ist, neben dem realistischen q-Profil, die Hauptverbesserung zur Standardabbildung. Der Parameter A wurde für alle Vergleichsrechnungen 1 gesetzt.

Damit ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}\dot{\psi} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta} = -\frac{K}{2\pi} \cdot \frac{A \cdot \psi}{1 + A \cdot \psi} \cdot \sin(2\pi \cdot \theta) \cdot f(t) \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H}{\partial \psi} = W(\psi) - \frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A}{(1 + A \cdot \psi)^2} \cdot \cos(2\pi \cdot \theta) \cdot f(t)\end{aligned}$$

in allgemeiner Form. Zur weiteren analytischen und numerischen Auswertung müssen nun noch Angaben über das gewünschte q-Profil und über die Funktion $f(t)$, die die zeitliche Abhängigkeit der Störung beschreibt, gemacht werden.

4.1.1 q-Profil

Experimentell wurden für verschiedene Parameter bei Entladungen sehr unterschiedliche Verscherungen des Magnetfeldes gefunden. Von quadratisch ansteigenden bis zu sogenannten „reversed-shear“ Profilen, bei denen das q-Profil außerhalb des zentralen Minimums weitere Extrema besitzt. Im Rahmen dieses Vergleichs wird das Profil

$$W(\psi) = \frac{1}{1 + d \cdot \psi} \quad \text{mit} \quad d = 3$$

benutzt, welches in Experimenten für bestimmte Typen von Entladungen gefunden werden kann. Der Wert $d = 3$ entspricht dabei der magnetischen Konfiguration im Fusionsexperiment TEXTOR-94 in Jülich [26].

4.1.2 Herleitung der Tokamap

Da der allgemeine Fall einer kontinuierlichen Zeitabhängigkeit nicht analytisch gelöst werden kann, wird die Zeitabhängigkeit

$$f(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(k - t)$$

als Summe über δ -Funktionen gewählt, so daß die Störung nur zu diskreten Zeiten auf das System einwirken kann. Dadurch erhält man direkt als Lösung

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= \psi_n - \frac{K}{2\pi} \cdot \frac{A \cdot \psi_{n+1}}{1 + A \cdot \psi_{n+1}} \cdot \sin(2\pi \cdot \theta_n) \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + W(\psi_{n+1}) - \frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A}{(1 + A \cdot \psi_{n+1})^2} \cdot \cos(2\pi \cdot \theta_n)\end{aligned}$$

oder eine zweite ähnliche Form, wobei die Indizes $n + 1$ und n so verteilt werden, daß die Jakobideterminante der Abbildung 1 ist und die Abbildung damit flächentreu. Diese Bedingung liefert jedoch keine eindeutige Lösung, weshalb es eine zweite äquivalente Form gibt, bei der einige Indizes vertauscht sind. Der Unterschied besteht darin, daß in einem Fall der Grenzübergang der Annäherung an die δ -Funktionen von kleineren und im anderen Fall von größeren Werten kommend durchgeführt wird.

Genau in diesem einseitigen Grenzübergang liegt auch ein gravierendes Problem der Herleitung der Tokamap verborgen. Der Störterm hängt sowohl vom Impuls als auch vom Ort ab, aber beide Werte müssen zu verschiedenen Zeiten betrachtet werden, um eine flächentreue Abbildung zu erhalten. Dies ist zwar, von einem mathematischen Standpunkt, aus der Herleitung erklärbar, physikalisch jedoch fragwürdig. Eine solche Trennung der Zeitpunkte der Auswertung, der in einem einzigen Störterm vorkommenden Variablen, läßt sich mit einem kontinuierlichen Grenzübergang nicht erreichen.

Die erhaltene implizite Form kann mit Hilfe der Funktion

$$P(\psi_n, \theta_n) = 1 - A \cdot \psi_n + \frac{K}{2\pi} \cdot A \cdot \sin(2\pi \cdot \theta_n)$$

in die explizite Form

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= \frac{1}{2 \cdot A} \left\{ \sqrt{P(\psi_n, \theta_n)^2 + 4 \cdot A \cdot \psi_n} - P(\psi_n, \theta_n) \right\} \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + W(\psi_{n+1}) - \frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A}{(1 + A \cdot \psi_{n+1})^2} \cdot \cos(2\pi \cdot \theta_n)\end{aligned}$$

umgeschrieben werden. Dies ist für die Auswertung von großem Vorteil, da die Abbildung dadurch direkt und ohne Iterationen berechnet werden kann.

4.1.3 Symplektischer Integrator

Um den durch eine zeitlich diskret angenommene Störung erzeugten Fehler näher zu untersuchen und um die Qualität der abgeleiteten Formeln zur Aufstellung eines symplektischen Integrators zu testen, wird das Hamiltonsche System in Untersysteme

$$H = H_1 + H_2 \cdot H_3, \quad H_{23} = H_2 \cdot H_3$$

aufgeteilt. Diese lauten

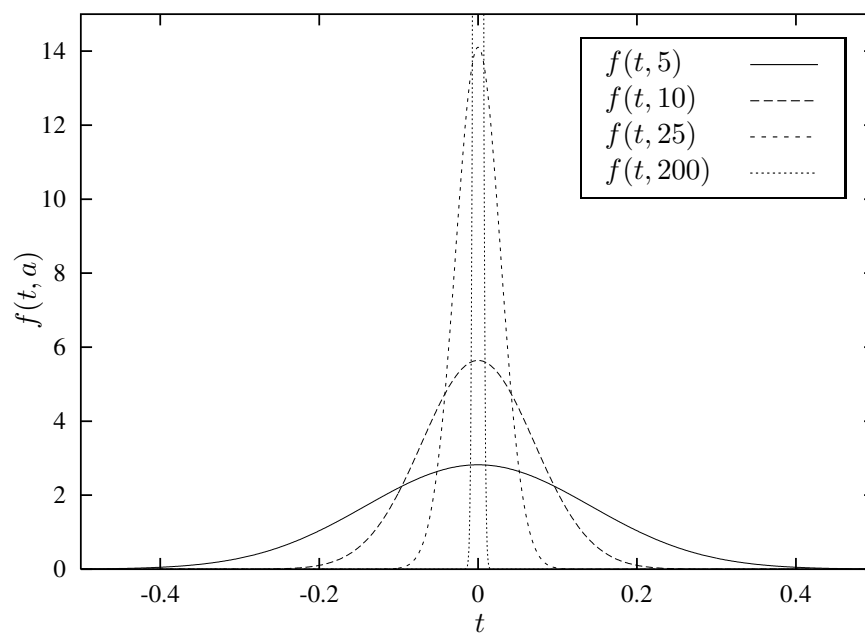
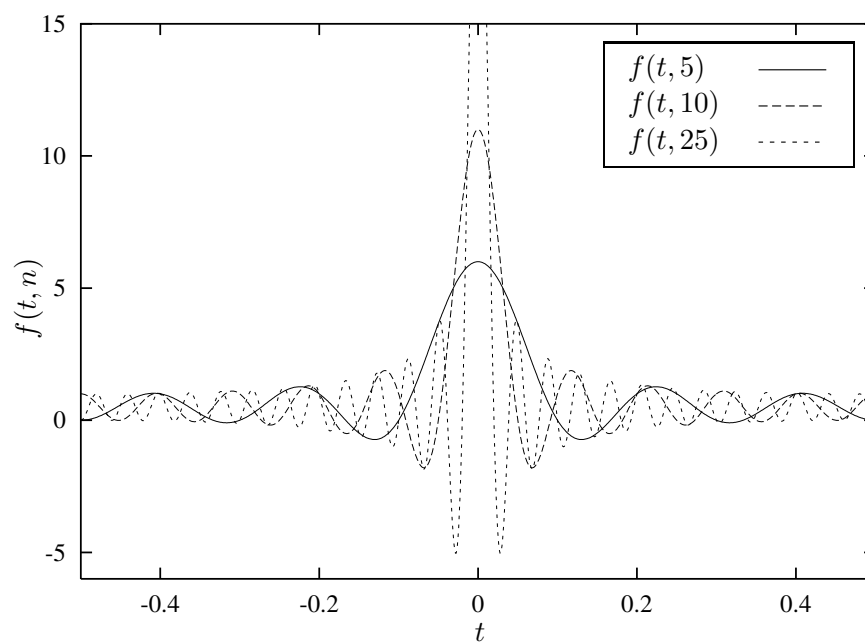
$$\begin{aligned} H_1 &= \int_{-\infty}^{\psi} d\psi' W(\psi') + p_t \\ H_2 &= \frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A \cdot \psi}{1 + A \cdot \psi} \\ H_3 &= -\cos(2\pi \cdot \theta) \cdot f(t) \end{aligned}$$

und beinhalten bereits die Erweiterung des Phasenraums, um ein formal zeitunabhängiges Gesamtsystem zu erhalten. Für die Zeitabhängigkeit kann prinzipiell jede mögliche gegen eine δ -Funktion konvergierende Funktion benutzt werden. Die Summe über Gaußfunktionen

$$f(t, a) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{a}{\sqrt{\pi}} \cdot \exp \{ -a^2 \cdot (t - k)^2 \}$$

bietet hierbei die Möglichkeit eines kontinuierlichen Grenzübergangs zum zeitlich diskreten System der Abbildung. Auch die Summe über Kosinusfunktionen

$$f(t, n) = \sum_{k=-n}^n \cos(2\pi \cdot k \cdot t)$$

Abbildung 4.1: Funktion $f(t, a)$ für verschiedene Parameterwerte a Abbildung 4.2: Funktion $f(t, n)$ für verschiedene Parameterwerte n

kann diese Anforderung erfüllen, jedoch besteht hier das Problem, daß n eine ganze Zahl darstellt und damit kein kontinuierlicher Übergang möglich ist. Weiterhin oszilliert die Funktion mit steigendem n immer stärker in der Umgebung der Maxima und wird dadurch für eine numerische Auswertung immer ungünstiger. Dieser Unterschied ist deutlich aus den beiden Abbildungen 4.1 und 4.2 der genäherten δ -Funktionen ersichtlich. Deshalb wurde die Summe der Gaußfunktionen anstelle der Kosinussumme für die Berechnung der Vergleichsdaten verwendet.

Für H_1 ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}\dot{\psi} &= -\frac{\partial H_1}{\partial \theta} = 0, & \dot{\theta} &= \frac{\partial H_1}{\partial \psi} = W(\psi) \\ \dot{p}_t &= -\frac{\partial H_1}{\partial t} = 0, & \dot{t} &= \frac{\partial H_1}{\partial p_t} = 1\end{aligned}$$

mit den Lösungen

$$\begin{aligned}\psi(\tau) &= \psi(0), & \theta(\tau) &= \theta(0) + \tau \cdot W(\psi(0)) \\ p_t(\tau) &= p_t(0), & t(\tau) &= t(0) + \tau\end{aligned}$$

und für H_2 analog

$$\begin{aligned}\dot{\psi} &= -\frac{\partial H_2}{\partial \theta} = 0, & \dot{\theta} &= \frac{\partial H_2}{\partial \psi} = \frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A}{(1 + A \cdot \psi)^2} \\ \dot{p}_t &= -\frac{\partial H_2}{\partial t} = 0, & \dot{t} &= \frac{\partial H_2}{\partial p_t} = 0\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}\psi(\tau) &= \psi(0), & \theta(\tau) &= \theta(0) + \tau \cdot \frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A}{(1 + A \cdot \psi(0))^2} \\ p_t(\tau) &= p_t(0), & t(\tau) &= t(0)\end{aligned}$$

als Lösung. Für H_3 muß zwischen den beiden beschriebenen Approximationen für die δ -Funktion unterschieden werden. Benutzt man die Summe über die Gaußfunktionen, so werden die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
\dot{\psi} &= -\frac{\partial H_3}{\partial \theta} = -2\pi \cdot \sin(2\pi \cdot \theta) \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{a}{\sqrt{\pi}} \cdot \exp \{-a^2 \cdot (t-k)^2\} \\
\dot{\theta} &= \frac{\partial H_3}{\partial \psi} = 0 \\
\dot{p}_t &= -\frac{\partial H_3}{\partial t} = -\cos(2\pi \cdot \theta) \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{2a^3 \cdot (t-k)}{\sqrt{\pi}} \cdot \exp \{-a^2 \cdot (t-k)^2\} \\
\dot{t} &= \frac{\partial H_3}{\partial p_t} = 0
\end{aligned}$$

durch

$$\begin{aligned}
\psi(\tau) &= \psi(0) - 2\pi \cdot \tau \cdot \sin(2\pi \cdot \theta(0)) \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{a}{\sqrt{\pi}} \cdot \exp \{-a^2 \cdot (t(0)-k)^2\} \\
\theta(\tau) &= \theta(0) \\
p_t(\tau) &= p_t(0) - \tau \cdot \cos(2\pi \cdot \theta(0)) \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{2 \cdot a^3 \cdot (t(0)-k)}{\sqrt{\pi}} \\
t(\tau) &= t(0)
\end{aligned}$$

gelöst, wogegen die für die Kosinussumme resultierenden Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}
\dot{\psi} &= -\frac{\partial H_3}{\partial \theta} = -2\pi \cdot \sin(2\pi \cdot \theta) \cdot \sum_{k=-n}^n \cos(2\pi \cdot k \cdot t) \\
\dot{\theta} &= \frac{\partial H_3}{\partial \psi} = 0 \\
\dot{p}_t &= -\frac{\partial H_3}{\partial t} = -2\pi \cdot \cos(2\pi \cdot \theta) \cdot \sum_{k=-n}^n k \cdot \sin(2\pi \cdot k \cdot t) \\
\dot{t} &= \frac{\partial H_3}{\partial p_t} = 0
\end{aligned}$$

die Lösung

$$\begin{aligned}
\psi(\tau) &= \psi(0) - 2\pi \cdot \tau \cdot \sin(2\pi \cdot \theta(0)) \cdot \sum_{k=-n}^n \cos(2\pi \cdot k \cdot t(0)) \\
\theta(\tau) &= \theta(0) \\
p_t(\tau) &= p_t(0) - 2\pi \cdot \tau \cdot \cos(2\pi \cdot \theta(0)) \cdot \sum_{k=-n}^n k \cdot \sin(2\pi \cdot k \cdot t(0)) \\
t(\tau) &= t(0)
\end{aligned}$$

besitzen. Aus diesen Teillösungen kann nun der symplektische Integrator

$$\begin{aligned}
S_2(\Delta\tau) &= \exp \left\{ \frac{\Delta\tau}{2} \cdot D_1 \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H_{23} \cdot \Delta\tau}{2 \cdot H_2} \cdot D_2 \right\} \cdot \dots \\
&\dots \cdot \exp \left\{ \frac{H_{23} \cdot \Delta\tau}{H_3} \cdot D_3 \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{H_{23} \cdot \Delta\tau}{2 \cdot H_2} \cdot D_2 \right\} \cdot \exp \left\{ \frac{\Delta\tau}{2} \cdot D_1 \right\}
\end{aligned}$$

zusammengesetzt werden. Dies geschieht am praktischsten direkt in den numerischen Routinen, da ein Einsetzen der teilweise recht komplexen Teillösungen keinen Vorteil im Aufwand verspricht, wie dies bei einfacheren Beispielen der Fall ist.

Zur Kontrolle der Güte des Integrators ist in Abbildung 4.3 die zeitliche Entwicklung der Gesamtenergie des Systems dargestellt. Die stärksten Schwankungen treten an den Stellen auf, an denen auch die approximierte δ -Funktion lokalisiert ist. Dies ist leicht verständlich, da zu diesen Zeiten der größte Energieübertrag zwischen den Teilsystemen auftritt und damit die verwendete Näherung für den Integrator die größten Fehler zeigt. Trotzdem sind die Schwankungen klein, wenn man bedenkt, daß der Parameter a in dieser Rechnung einen Wert von 200 besitzt und damit bereits eine sehr stark lokalisierte Funktion mit großer Amplitude beschreibt.

Daß die Approximation mit dem gewählten Wert für den Parameter a bereits gut eine δ -Funktion beschreibt, erkennt man an Abbildung 4.4. Dort ist der zeitliche Verlauf des Impulses ψ des Systems aufgetragen. Man erkennt, daß der Impuls keine kontinuierliche Änderung in der Zeit mehr aufweist, sondern zwischen diskreten Werten springt. Dabei sind die Positionen der Sprünge mit den Positionen der approximierten δ -Funktionen identisch.

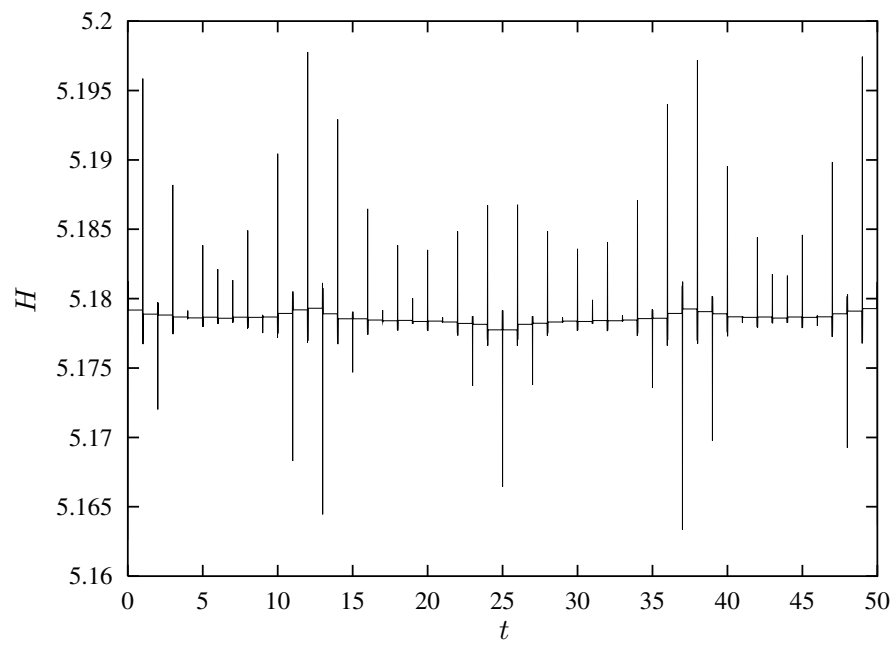
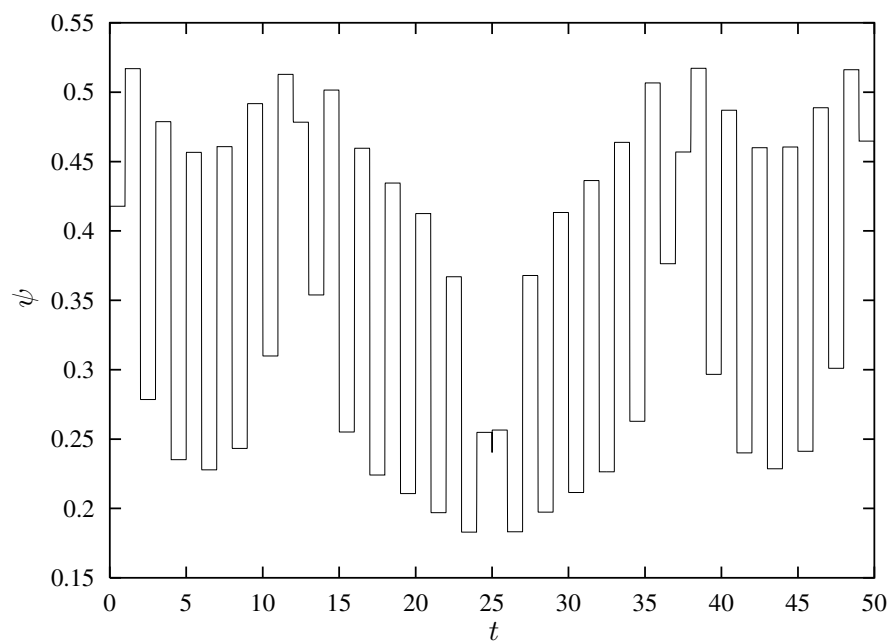


Abbildung 4.3: Schwankung der Systemenergie

Abbildung 4.4: Zeitliche Entwicklung von ψ

4.1.4 Vergleich

Die Übereinstimmung zwischen dem Ergebnis der Integration und der Tokamap ist denkbar schlecht. Zum einen fällt bereits bei kleinen Störungen auf, daß das Ergebnis der Integration symmetrisch zur ψ -Achse ist, während keine solche Symmetrie bei der Tokamap vorliegt.

Weiterhin erkennt man, daß bei größeren Störungen bei der Tokamap mehr Flußflächen gebrochen werden als bei der Integration. Der „chaotische“ Bereich ist größer, wodurch der Transport in diesem System stark beeinflusst wird. Daher stellt sich natürlich die Frage, wie dies überhaupt möglich ist.

Bereits in der Herleitung wurde die Methode zur Auswertung der δ -Funktionen als kritisch erachtet. Korrekt wäre eine Auswertung, die auf einer Funktionenfolge beruht, die im Grenzübergang gegen eine δ -Funktion konvergiert. Der in der Herleitung verwendete Grenzübergang scheint zwar für beliebige endliche ε zu gelten, jedoch nicht mehr im Grenzfall $\varepsilon = 0$.

4.2 Symmetrische Abbildung

Aufgrund der schlechten Übereinstimmung zwischen Tokamap und Integration bieten es sich an, eine „bessere“ Auswertung der δ -Funktion zu verwenden. Diese symmetrische Auswertung geht von dem Bild einer ausgedehnten Funktion der Zeitabhängigkeit aus, die im Grenzfall gegen eine δ -Funktion konvergiert.

4.2.1 Herleitung

In Abbildung 4.6 ist schematisch dargestellt, wie die Berechnung eines vollständigen Zeitschrittes durch Teilschritte erfolgt. Der entscheidende Punkt ist, daß der Wert von ψ und θ nicht als linksseitiger oder rechtsseitiger Grenzwert definiert wird, sondern als Mittel aus beiden. Jeweils gleiche „Anteile“ der δ -Funktion befinden sich vor der Zeit t_n und danach.

Ausgehend von dem bekannten Hamiltonschen System

$$H = \int_{-\infty}^{\psi} d\psi' W(\psi') + f(\psi) \cdot g(\theta) \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(t - k)$$

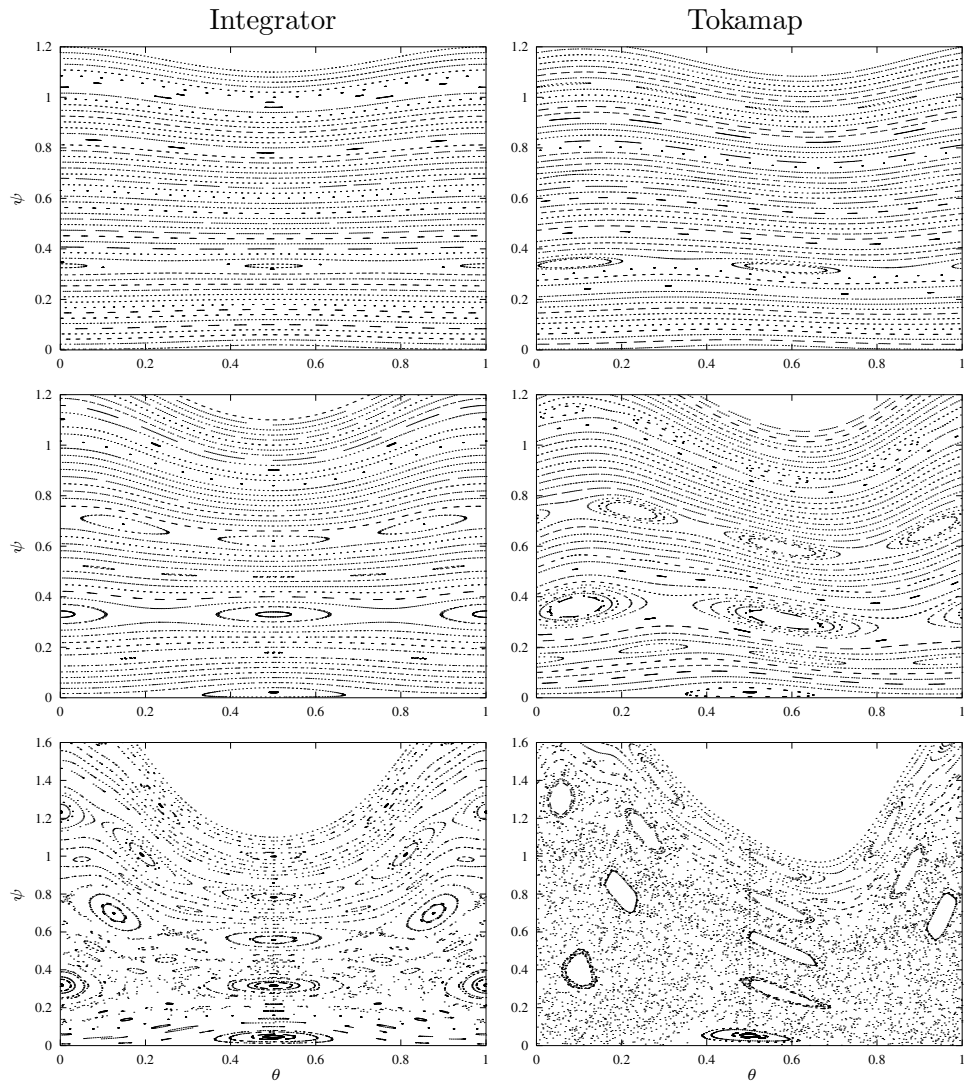


Abbildung 4.5: Vergleich Integration und Tokamap

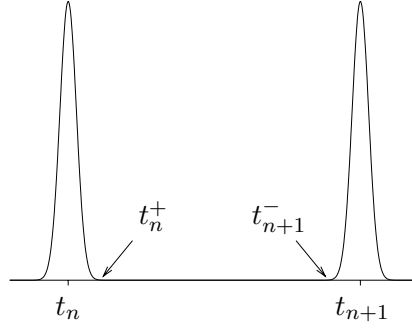


Abbildung 4.6: Konstruktionsschema der symmetrischen Abbildung

mit

$$f(\psi) = -\frac{K}{(2\pi)^2} \cdot \frac{A \cdot \psi}{1 + A \cdot \psi} \quad \text{und} \quad g(\theta) = \cos(2\pi \cdot \theta)$$

ergeben sich wiederum die Bewegungsgleichungen, wobei zur besseren Übersichtlichkeit die Funktionen $f(\psi)$ und $g(\theta)$ beibehalten werden.

$$\begin{aligned} \dot{\psi} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta} = -f(\psi) \cdot \frac{\partial g(\theta)}{\partial \theta} \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(t - k) \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H}{\partial \psi} = W(\psi) + \frac{\partial f(\psi)}{\partial \psi} \cdot g(\theta) \cdot \sum_{k=-\infty}^{\infty} \delta(t - k) \end{aligned}$$

Integriert man dieses System nun von der Zeit t_n zur Zeit t_n^+ , so muß die Störung zur Zeit t_n berechnet werden. Da aber die δ -Funktion symmetrisch aufgeteilt wird, ergibt sich ein zusätzlicher Vorfaktor $1/2$.

$$\psi_n^+ = \psi_n - \frac{1}{2} \cdot f(\psi_n) \cdot \frac{\partial g(\theta_n)}{\partial \theta}, \quad \theta_n^+ = \theta_n + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial f(\psi_n)}{\partial \psi} \cdot g(\theta_n)$$

Während der Zeitspanne von t_n^+ bis t_{n+1}^- ist die lokalisierte Störung nicht wirksam, so daß nur der integrable Anteil des Hamiltonschen Systems einen Beitrag leistet.

$$\psi_{n+1}^- = \psi_n^+, \quad \theta_{n+1}^- = \theta_n^+ + W(\psi_n^+)$$

Und schließlich kommt man mit einem weiteren Schritt von der Zeit t_{n+1}^- zur gewünschten Zeit t_{n+1} , um damit die Integration einer vollständigen Iteration der Abbildung auszuführen.

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= \psi_{n+1}^- - \frac{1}{2} \cdot f(\psi_{n+1}) \cdot \frac{\partial g(\theta_{n+1})}{\partial \theta} \\ \theta_{n+1} &= \theta_{n+1}^- + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial f(\psi_{n+1})}{\partial \psi} \cdot g(\theta_{n+1})\end{aligned}$$

Setzt man die Ergebnisse der einzelnen Zwischenschritte ineinander ein, so erhält man

$$\begin{aligned}\psi_{n+1} &= \psi_n - \frac{1}{2} \cdot f(\psi_n) \cdot \frac{\partial g(\theta_n)}{\partial \theta} - \frac{1}{2} \cdot f(\psi_{n+1}) \cdot \frac{\partial g(\theta_{n+1})}{\partial \theta} \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + W \left(\psi_n - \frac{1}{2} \cdot f(\psi_n) \cdot \frac{\partial g(\theta_n)}{\partial \theta} \right) + \dots \\ &\quad \dots + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial f(\psi_n)}{\partial \psi} \cdot g(\theta_n) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial f(\psi_{n+1})}{\partial \psi} \cdot g(\theta_{n+1})\end{aligned}$$

als vollständige implizite Form der Abbildung. Im Gegensatz zur Tokamap kann diese Abbildung nicht explizit aufgelöst werden. Sie muß also durch Iteration berechnet werden.

4.2.2 Vergleich

Vergleicht man das Ergebnis (Abbildung 4.7) dieser symmetrischen Abbildung mit dem der Integration, so kann man eine nahezu perfekte Übereinstimmung feststellen. Daraus folgt, daß die Auswertung der δ -Funktion einen bedeutenden Einfluß auf die Übereinstimmung zwischen dem tatsächlichen System und der Abbildung hat.

Insbesondere liefert die für die Tokamap verwendete Methode der Auswertung ein falsches Ergebnis. Dies unterstreicht, daß man den Grenzübergang mit äußerster Sorgfalt ausführen muß. Sämtliche Überlegungen zur Tokamap gelten ebenso für die Standardabbildung. Es sind lediglich passende Funktionen $f(\psi)$ und $g(\theta)$ zu wählen und man erhält die symmetrische Form der Standardabbildung.

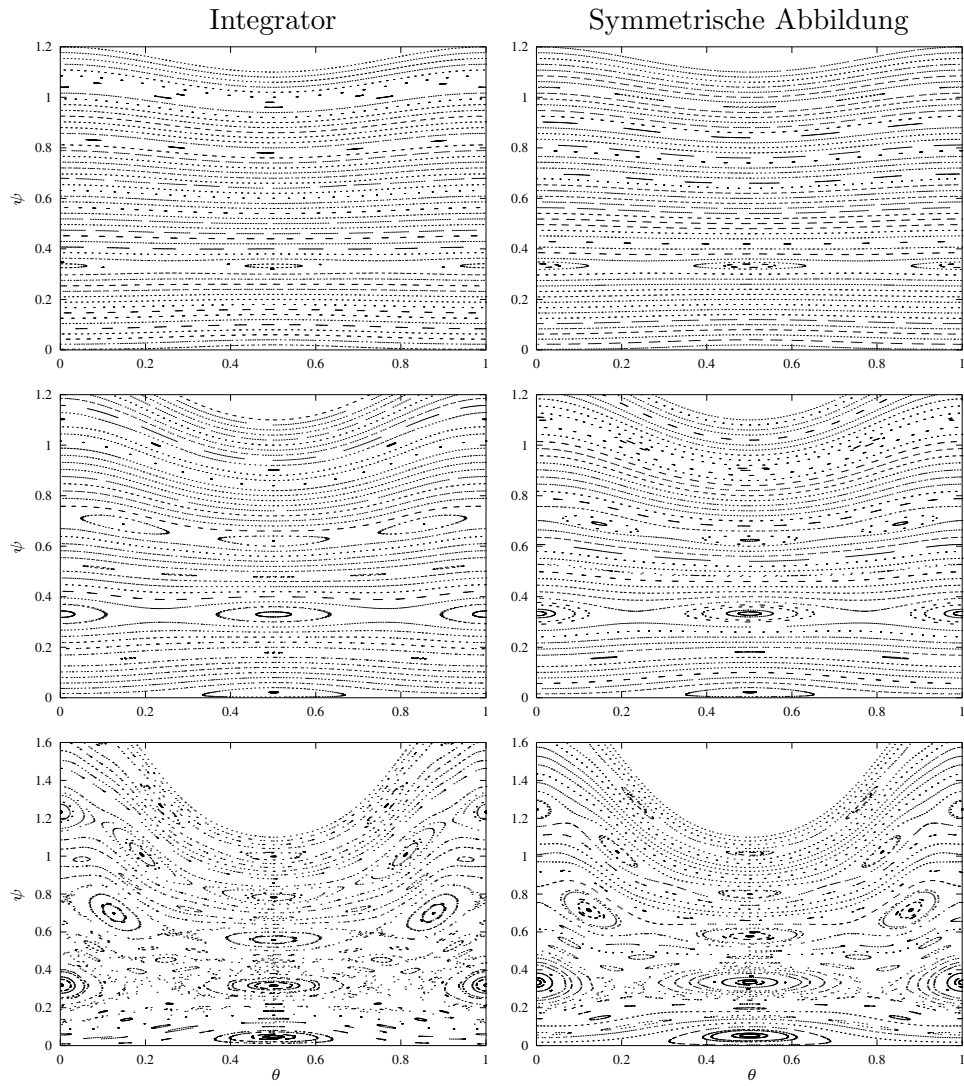


Abbildung 4.7: Vergleich Integration und symmetrische Abbildung

Weiterhin ist damit auch gezeigt, daß der symplektische Integrator tatsächlich in der Lage ist, selbst eine stark lokalisierte Funktion detailliert und genau zu integrieren. Damit bleibt lediglich zu klären, wie stark sich das System selber ändert, wenn man die zeitliche Lokalisierung der Störung durch eine breitere (und damit auch realistischere) Verteilung ersetzt.

4.3 Schlußfolgerungen

Aus den verschiedenen vorgestellten Ansätzen lassen sich eine Reihe interessanter Schlußfolgerungen ziehen. Auf jeden Fall sollten abgeleitete Abbildungen stets durch numerische Integration auf ihre Korrektheit überprüft werden. Eine rein mathematisch korrekte Herleitung, zusammen mit der Grundbedingung einer flächentreuen Abbildung, liefert keineswegs automatisch das gewünschte Ergebnis.

4.3.1 Auswertung der Deltafunktion

Einen entscheidenden Einfluß auf die Struktur der Abbildung und auf das damit erzielte Ergebnis übt die verwendete Methode der Auswertung der δ -Funktion aus. Eine weniger mathematisch, dafür aber mehr physikalisch, geleitete Vorstellung liefert nicht nur eine konstruktive Methode sondern auch ein mit der numerischen Integration übereinstimmendes Ergebnis.

Es gibt keine Wahlmöglichkeit den Grenzwert von verschiedenen Zeiten kommand auszuführen und dadurch auch keine verschiedenen Möglichkeiten der Wahl der Indizes n und $n + 1$ im Störungsterm. Diese ergeben sich eindeutig aus der Ableitung selber und enthalten auch keine physikalisch schwer zu rechtfertigenden Mischungen verschiedener Zeiten. Daher ist die symmetrische Auswertung der δ -Funktionen wichtig zur Ableitung von Abbildungen aus „geklickten“ Hamiltonschen Systemen.

4.3.2 Verteilungen endlicher Breite

Eine weitere wichtige Frage ist, welchen Einfluß die zeitliche Lokalisierung der Störung auf die Dynamik des untersuchten Systems ausübt. Dies läßt

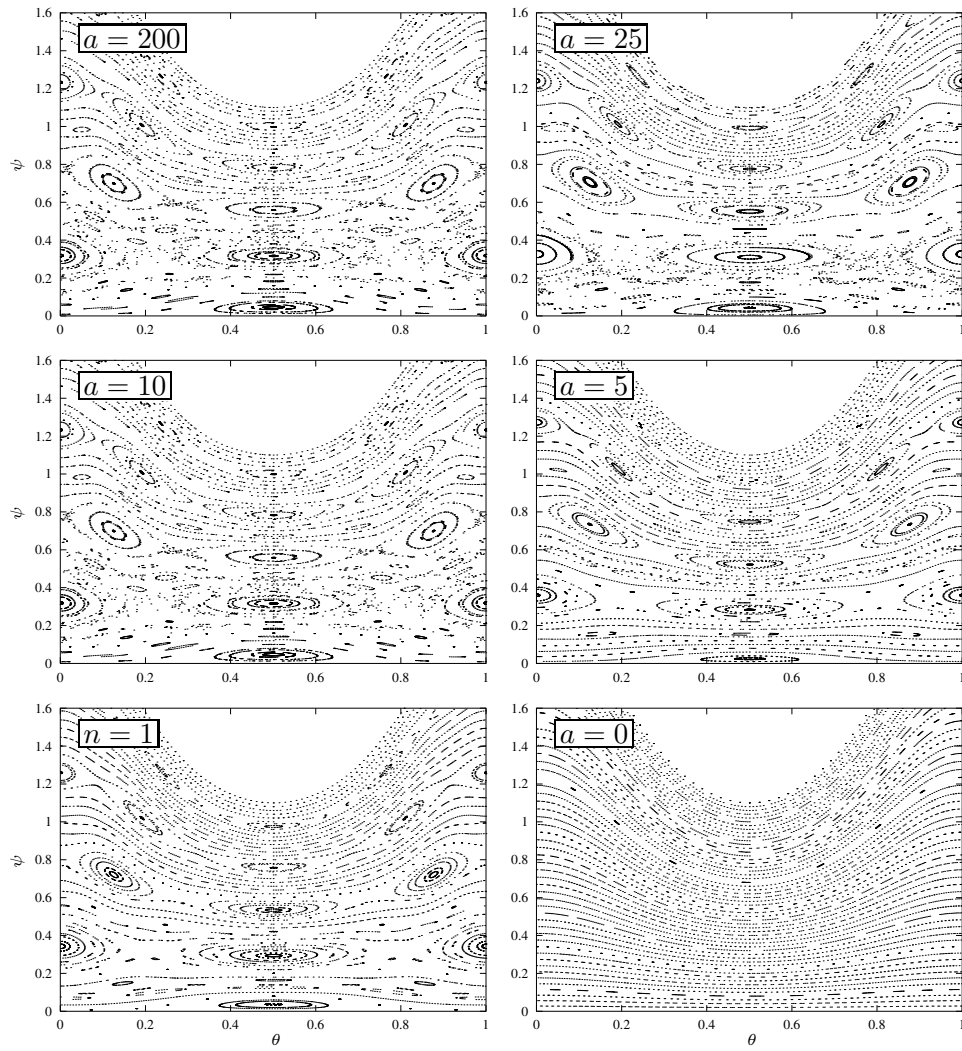


Abbildung 4.8: Integration mit $K = 6.00$ und verschiedenen Approximationen der δ -Funktion

sich mit Hilfe des numerischen Integrators einfach untersuchen, da dort die Breite der δ -Funktion frei gewählt werden kann.

Es zeigt sich, daß der Unterschied zwischen einer breiten, aber lokalisierten, Störung und einer scharfen δ -Funktion relativ gering ist. Die wesentlichen topologischen Merkmale bleiben unverändert. Die genauen Grenzen zwischen integriblen und chaotischen Bereichen des Phasenraums werden leicht verschoben, jedoch ergibt sich erst im Grenzfall einer nicht-lokalisierten Störung ($a = 0$) eine veränderte Topologie.

Weiterhin zeigt sich, daß die Wahl der Approximation der δ -Funktion keinen starken Einfluß ausübt. Auch eine über Kosinusfunktionen genäherte δ -Funktion ergibt ein topologisch korrektes Abbild des Phasenraums. Die genaue Form der Lokalisierung der Störung ist nicht entscheidend. Selbst eine δ -Funktion stellt umgekehrt noch eine hinreichend gute Approximation einer lokalisierten, aber nicht singulären, Verteilung dar.

4.3.3 implizite Abbildungen

Obwohl die hier vorgestellte konstruktive Methode bisher verwendeten überlegen ist, so bleibt doch ein wesentliches weiteres Grundproblem bestehen. Die abgeleiteten Abbildungen (egal ob symmetrisch oder nicht) ergeben sich in impliziter Form. Dies ist ein generelles Problem, da nur in seltenen Fällen die implizite Form auch in eine explizite aufgelöst werden kann. Im Falle der Tokamap ist dies noch möglich, für die symmetrische Variante bereits nicht mehr.

Abgesehen von der benötigten Rechenzeit für die Lösung einer solchen impliziten Abbildung, stellt sich auch die Frage der Konvergenz bei iterativer Berechnung. Im allgemeinen sind die impliziten Terme klein, so daß dies kein Problem darstellen sollte. Jedoch beweist dies nicht die Konvergenz. Diese müßte eigentlich für jede Abbildung einzeln gezeigt werden.

Aus der impliziten Form ergibt sich auch die Schwierigkeit der Berechnung der Jakobideterminante zum Nachweis der Flächentreue der Abbildung. Für einige Abbildungen ist der Nachweis auch in der impliziten Form möglich, weil sich Terme geschickt gruppieren lassen, jedoch ist auch dies wiederum nicht für alle Abbildungen durchführbar. In solch einem Fall hilft dann nur der Vergleich auf Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Integration. Dies ist zwar kein strenger mathematischer Beweis, aber in der Praxis meist ausreichend.

Kapitel 5

Das Modellsystem

Nachdem nun die Theorie zur Ableitung eines symplektischen Integrators vorhanden ist, kann diese auf ein Hamiltonsches System angewandt werden, das möglichst viele charakteristische Eigenschaften eines Feldliniensystems in einem realen Experiment besitzt. Es geht dabei nicht darum, eine gegebene Feldkonfiguration wirklich exakt zu beschreiben, sondern darum, die topologischen Eigenschaften dieser Konfigurationen korrekt zu erfassen.

Das wesentliche Merkmal der Magnetfelder in Fusionsexperimenten ist der Wechsel von geschlossenen Flußflächen mit aufgebrochenen. Im Idealfall hätte man gerne ein vollständiges System solcher geschlossener Flächen, da dies keinen radialen Transport durch Feldlinien bedeuten würde. Dies ist jedoch in der Praxis nicht realisierbar, da stets Störungen der idealen Konfiguration vorhanden sind. Diese führen zu gebrochenen Flußflächen und damit auch einem Transportbeitrag in radialer Richtung durch Feldlinien [40].

Deshalb ist auch das hier untersuchte Modellsystem so aufgebaut, daß neben einem integrablen Anteil mit „perfekten“ ungebrochenen Flußflächen, eine zusätzliche Störung wirkt, welche lokalisiert solche Flächen aufbricht. Diese nichtintegrablen Bereiche werden oft auch als „chaotische“ oder „ergodische“ Gebiete des Phasenraums eines solchen Systems bezeichnet [48].

5.1 Hamiltonfunktion

Das Hamiltonsche System muß zur Konstruktion eines symplektischen Integrators in drei Teile aufgespalten werden, so daß jeder Teil für sich genommen

analytisch gelöst werden kann. Dabei ergibt sich die bereits im Kapitel über symplektische Integratoren genannte Form der Hamiltonfunktion.

$$H = H_1 + H_2 \cdot H_3$$

Hierbei beschreibt der erste Teil den integrablen Beitrag und der zweite und dritte Teil die Störung des Feldes.

5.1.1 q-Profil

Aus Messungen an vielen Entladungen in Fusionsexperimenten weiß man, daß die Grundstruktur des Magnetfeldes eine nach außen abnehmende Verscherung besitzt. Dies erreicht man in Tokamakexperimenten durch Ströme im Plasma, während in einem Stellarator selbige durch externe Ströme realisiert werden. Gegeben ist die Stärke der Verscherung durch das q-Profil als dem Verhältnis zwischen toroidalem und poloidalem Fluß.

$$H_1 = \int_{\psi'}^{\psi} \frac{1}{q(\psi')} + p_t = \frac{1}{\sqrt{d}} \cdot \arctan(\sqrt{d} \cdot \psi) + p_t \quad \text{mit} \quad d = 3$$

Der Verlauf des q-Profils bestimmt die Lage und die Ausdehnung von Resonanzen und Inseln in der Topologie des Magnetfeldes, weshalb ein realistisch gewähltes Profil wichtig ist. Das hier verwendete Profil entspricht im wesentlichen den experimentell gefundenen q-Profilen.

5.1.2 Störung

Diesem Feld ist eine Störung überlagert, die in ihrer poloidalen Abhängigkeit einer von Elsässer et al. [24] angegebenen entspricht. Die Wahl der Fourierkomponenten und der berücksichtigten Modennummern approximiert die im Experiment JET vorliegenden Verhältnisse. Natürlich kann dies die tatsächliche Konfiguration nicht exakt beschreiben, sondern nur zu einem akzeptablen Grad annähern.

Eine solche rein poloidale Störung würde jedoch nicht die Invarianz der magnetischen Achse garantieren, weshalb von Balescu et al. [6] eine zusätzliche

radiale Abhängigkeit vorgeschlagen wurde. Dies ist nötig, da der toroidale Fluß ψ in diesem System proportional dem Quadrat des Abstands von der magnetischen Achse ist und daher negative Werte für ψ nicht auftreten dürfen.

Da die gesamte Störung nicht analytisch integrabel ist, muß sie in zwei Produktterme aufgespalten werden, wobei

$$H_2 = \varepsilon \cdot \frac{A \cdot \psi}{1 + A \cdot \psi} \quad \text{mit} \quad A = 1$$

die radiale Abhängigkeit und

$$H_3 = \sum_{m=4}^{11} \frac{1}{(m+1)^2} \cdot \cos(2 \cdot \pi (m \cdot \theta - n \cdot t)) \quad \text{mit} \quad n = 3$$

die poloidale und toroidale Abhängigkeit der Störung beschreibt. Beide enthalten jeweils nur eine von beiden kanonisch konjugierten Variablen und sind damit trivial integrierbar.

Die Störung bewirkt ein mit wachsendem ε immer stärkeres Aufbrechen der Flußflächen, so daß für sehr große Werte von ε ein immer größerer chaotischer Bereich entsteht und immer mehr von der vorher vorhandenen Struktur verloren geht.

5.1.3 Integrator

Für die Konstruktion des symplektischen Integrators werden nun zunächst die analytischen Teillösungen der einzelnen Untersysteme benötigt. Durch die gewählte Zerlegung ergeben sich durchweg einfach zu lösende Bewegungsgleichungen.

Das erste Teilsystem H_1 enthält neben dem integrablen Anteil der Magnetfeldkonfiguration auch noch den benötigten Hilfsimpuls p_t um ein formal zeitunabhängiges Gesamtsystem aufzustellen. Aus den Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}\dot{\psi} &= -\frac{\partial H_1}{\partial \theta} = 0, & \dot{p}_t &= -\frac{\partial H_1}{\partial t} = 0 \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H_1}{\partial \psi} = \frac{1}{1+d \cdot \psi^2}, & \dot{t} &= \frac{\partial H_1}{\partial p_t} = 1\end{aligned}$$

ergeben sich unmittelbar die Lösungen

$$\begin{aligned}\psi(\tau) &= \psi(0), & p_t(\tau) &= p_t(0) \\ \theta(\tau) &= \theta(0) + \tau \cdot \frac{1}{1+d \cdot \psi(0)^2}, & t(\tau) &= t(0) + \tau\end{aligned}$$

für das System.

Die radiale Abhängigkeit der Störung H_2 variiert lediglich mit ψ , wodurch sich nur für $\dot{\theta}$ eine nichtverschwindende Gleichung ergibt.

$$\begin{aligned}\dot{\psi} &= -\frac{\partial H_2}{\partial \theta} = 0, & \dot{p}_t &= -\frac{\partial H_2}{\partial t} = 0 \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H_2}{\partial \psi} = \varepsilon \cdot \frac{A}{(1+A \cdot \psi)^2}, & \dot{t} &= \frac{\partial H_2}{\partial p_t} = 0\end{aligned}$$

Deshalb sind natürlich auch in der Lösung alle Variablen außer θ konstant.

$$\begin{aligned}\psi(\tau) &= \psi(0), & p_t(\tau) &= p_t(0) \\ \theta(\tau) &= \theta(0) + \tau \cdot \varepsilon \cdot \frac{A}{(1+A \cdot \psi(0))^2}, & t(\tau) &= t(0)\end{aligned}$$

Schließlich fehlt noch der poloidale und toroidale Anteil der Störung H_3 . Dieser vervollständigt das System und liefert mit seiner Abhängigkeit von θ und t die Dynamik für die beiden Impulse.

Aus

$$\begin{aligned}\dot{\psi} &= -\frac{\partial H_3}{\partial \theta} = 2 \cdot \pi \cdot \sum_{m=4}^{11} \frac{m}{(m+1)^2} \cdot \sin(2 \cdot \pi (m \cdot \theta - n \cdot t)) \\ \dot{\theta} &= \frac{\partial H_3}{\partial \psi} = 0 \\ \dot{p}_t &= -\frac{\partial H_3}{\partial t} = -2 \cdot \pi \cdot \sum_{m=4}^{11} \frac{n}{(m+1)^2} \cdot \sin(2 \cdot \pi (m \cdot \theta - n \cdot t)) \\ \dot{t} &= \frac{\partial H_3}{\partial p_t} = 0\end{aligned}$$

erhält man direkt

$$\begin{aligned}\psi(\tau) &= \psi(0) + \tau \cdot 2 \cdot \pi \cdot \sum_{m=4}^{11} \frac{m}{(m+1)^2} \cdot \sin(2 \cdot \pi (m \cdot \theta(0) - n \cdot t(0))) \\ \theta(\tau) &= \theta(0) \\ p_t(\tau) &= p_t(0) - \tau \cdot 2 \cdot \pi \cdot \sum_{m=4}^{11} \frac{n}{(m+1)^2} \cdot \sin(2 \cdot \pi (m \cdot \theta(0) - n \cdot t(0))) \\ t(\tau) &= t(0)\end{aligned}$$

als Lösung. Damit stehen nun alle benötigten Hilfsmittel zur symplektischen Integration des Systems zur Verfügung.

5.1.4 Vergleich verschiedener Schrittweiten

Um die Stabilität des Integrators für große Zeitschritte beispielhaft zu zeigen, ist in den Abbildungen 5.1, 5.2 und 5.3 das Ergebnis einer numerischen Integration einer festen Anfangsbedingung dargestellt.

Auf allen dargestellten Zeitskalen sind keine Abweichungen der Kurven untereinander vorhanden, die größer als der durch die Ensemblemittelung zu erwartende statistische Fehler sind. Dies ist bemerkenswert, da zum einen der Unterschied zwischen der kleinsten und der größten Schrittweite einen Faktor

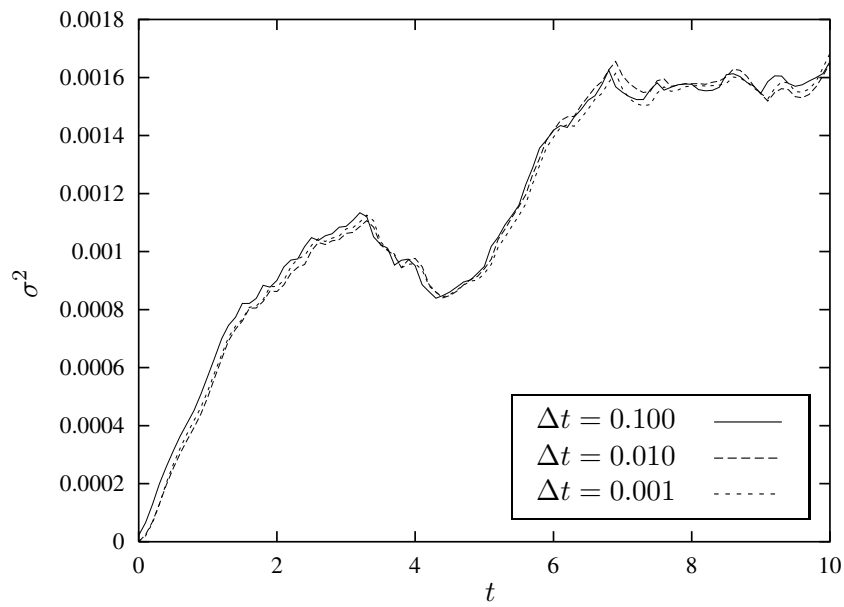


Abbildung 5.1: Verhalten der Varianz für verschiedene Schrittgrößen der Integration auf einer kurzen Zeitskala

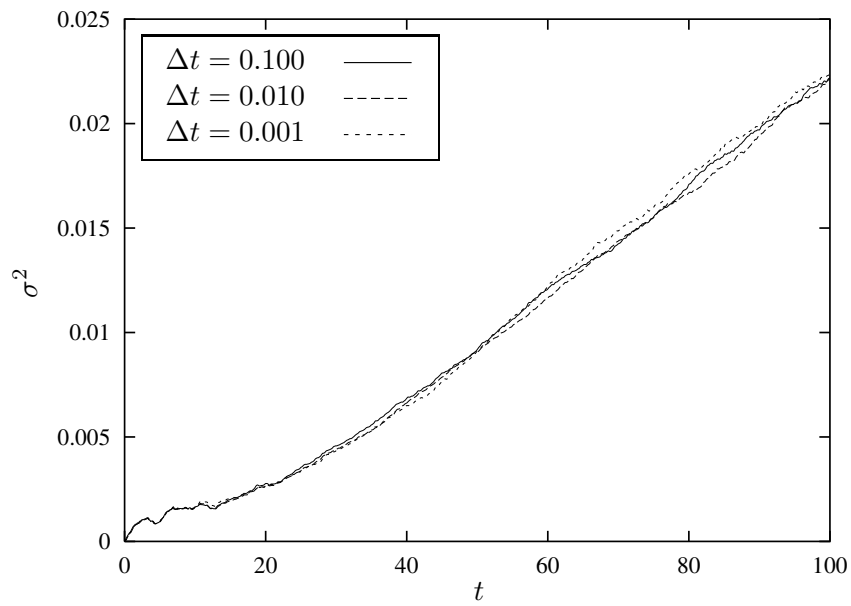


Abbildung 5.2: Verhalten der Varianz für verschiedene Schrittgrößen der Integration auf einer mittleren Zeitskala

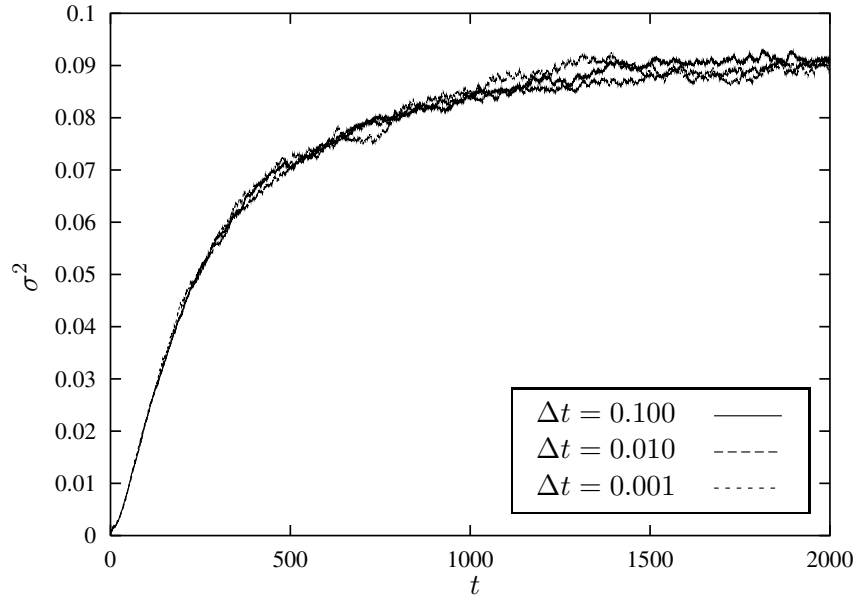


Abbildung 5.3: Verhalten der Varianz für verschiedene Schrittgrößen der Integration auf einer langen Zeitskala

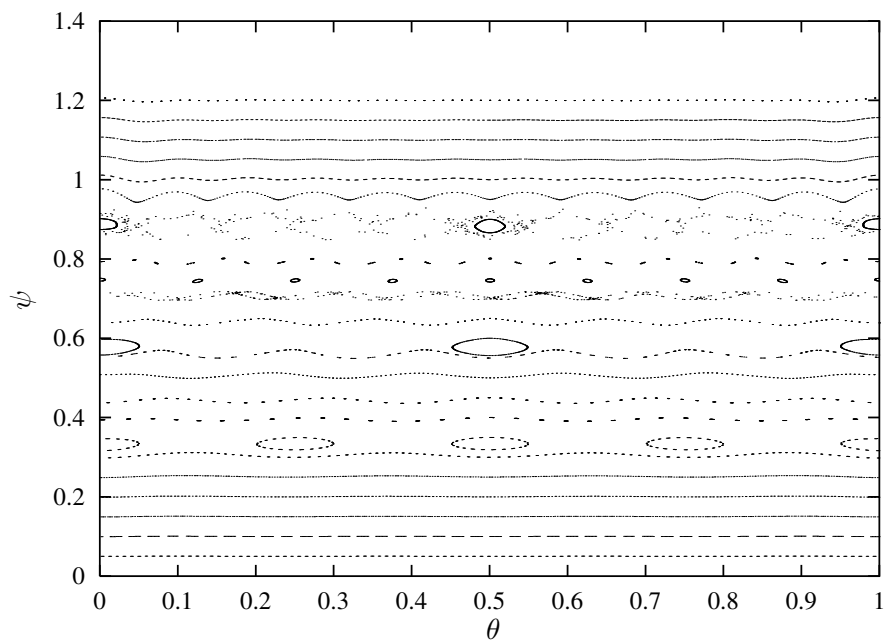
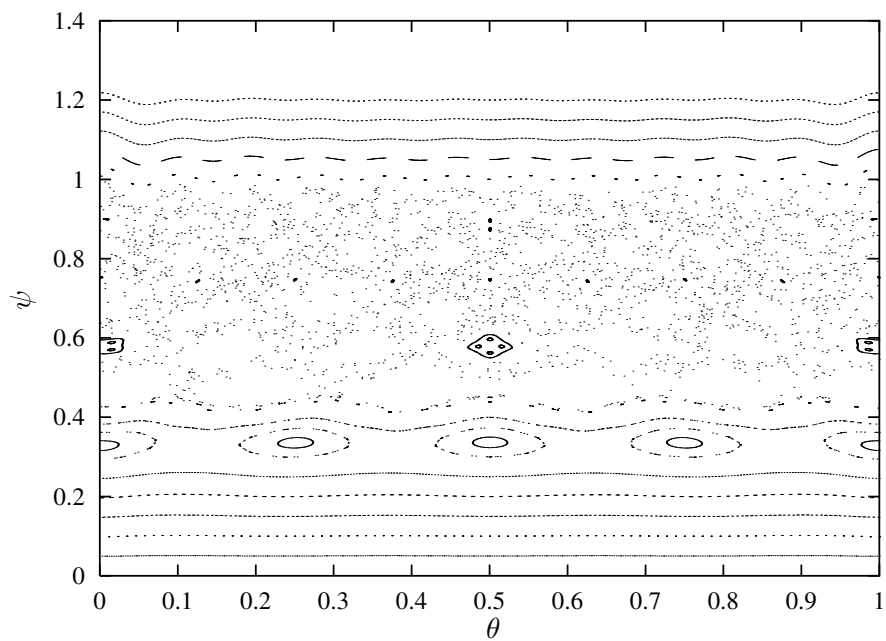
100 beträgt, und andererseits, weil die größte Schrittweite mit lediglich 10 Schritten einen vollständigen Umlauf um den Torus berechnet. Eine solche Schrittweite kann bereits nicht mehr als Integration bezeichnet werden. Es ist eine Abbildung.

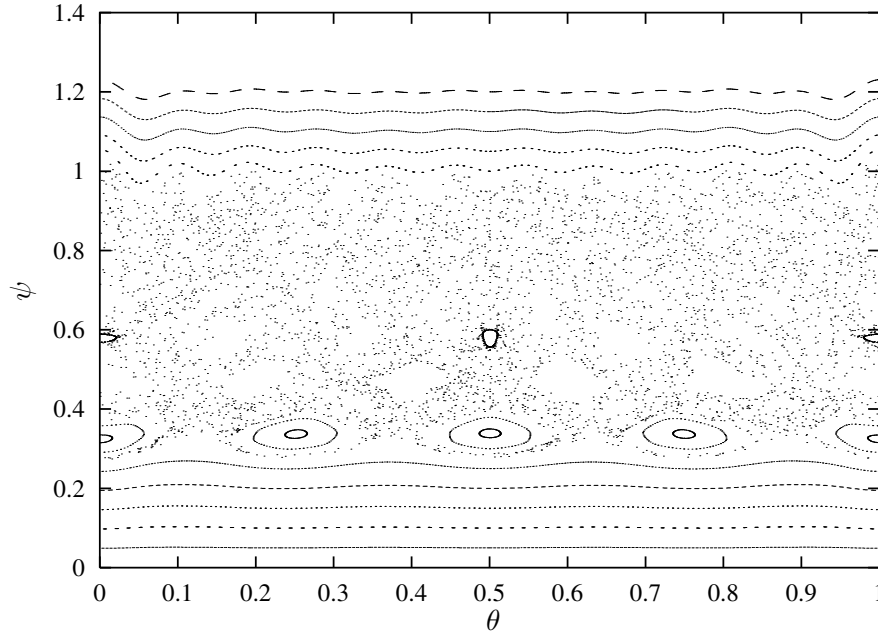
5.1.5 Poincaré-Schnitte

Um einen Überblick über die wesentlichen topologischen Eigenschaften eines Systems zu bekommen, bietet sich auch in der Plasmaphysik die Darstellung von Poincaré-Schnitten an.

Die Schnittebene ist dabei durch eine feste toroidale Position gegeben. Für verschiedene Stärken der Störung (Abbildungen 5.4, 5.5 und 5.6) erkennt man den Übergang des Systems von einem integrablen mit intakten KAM-Flächen zu einem System mit gebrochenen. Mit steigendem ε verschwindet immer stärker die Struktur des Systems und es bildet sich ein „chaotischer“ Bereich heraus.

Für sehr große Werte von ε wird die Störung schließlich so dominant, daß

Abbildung 5.4: Poincaréabbildung des Phasenraums für $\varepsilon = 0.02$ Abbildung 5.5: Poincaréabbildung des Phasenraums für $\varepsilon = 0.06$

Abbildung 5.6: Poincaréabbildung des Phasenraums für $\varepsilon = 0.10$

das System vollständig stochastisch wird und damit ein klassisches diffusives Verhalten zeigt. Interessant ist jedoch vielmehr der dazwischen liegende Grenzbereich, da dieser in der Topologie der Konfigurationen von Fusionsexperimenten realisiert ist.

5.2 Teilchendriften

Wie bereits 1966 von Morozov und Solov'ev gezeigt wurde, können die durch Driften bewirkten Abweichungen der Teilchen von den Feldlinien mit in die Beschreibung des Magnetfeldes einbezogen werden. Das tatsächliche Feld wird dabei durch ein transformiertes ersetzt, welches die Eigenschaft hat, daß die Feldlinien in dem transformierten System gerade der tatsächlichen Bewegung der Gyrationenmittelpunkte der Teilchen in dem ursprünglichen entsprechen.

Morozov und Solov'ev [37] erhielten durch Umformung der Driftgleichung für Teilchen die folgende Form für die Geschwindigkeit der Gyrationenzentren

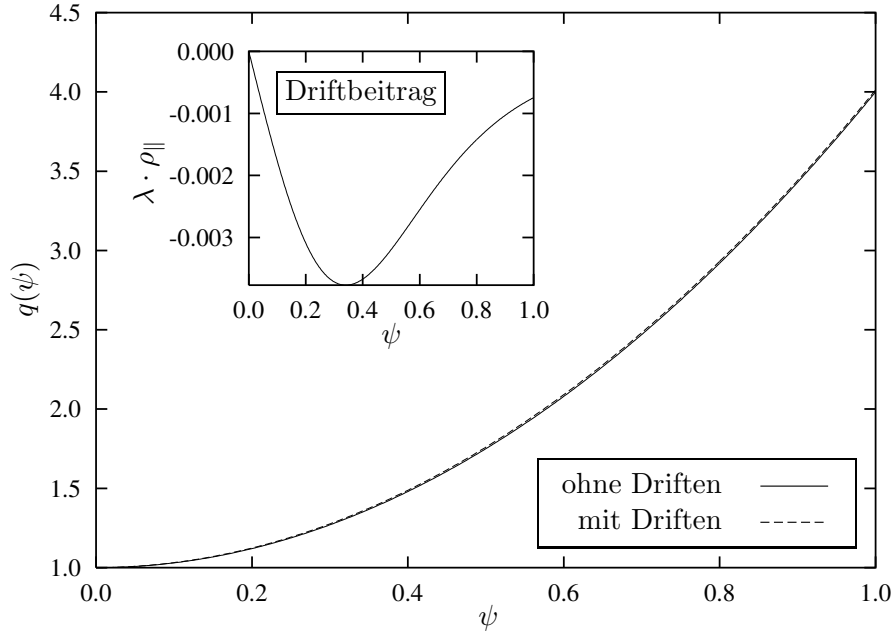


Abbildung 5.7: Veränderung des q -Profils durch Einbeziehung von Driften

$$\mathbf{v} = \frac{v_{\parallel}}{B} \cdot (\mathbf{B} + \nabla \times (\rho_{\parallel} \cdot \mathbf{B}))$$

mit

$$v_{\parallel} = \sqrt{\frac{2}{m} \cdot (E - \mu \cdot B)}, \quad \rho_{\parallel} = \frac{v_{\parallel}}{\Omega} \quad \text{und} \quad \Omega = \frac{e \cdot B}{m}.$$

Aus dieser Darstellung läßt sich direkt die Gleichung für das transformierte Magnetfeld

$$\mathbf{B}^* = \mathbf{B} + \nabla \times (\rho_{\parallel} \cdot \mathbf{B})$$

aufstellen [58]. Um dieses transformierte Magnetfeld für die Berechnung verwenden zu können, müssen die dimensionsbehafteten Größen zuerst dimensionslos gemacht werden. Für die Energie wird die thermische Energie

$$E = \frac{m}{2} \cdot v_{th}^2$$

der Teilchen verwendet und für die Zeitskala das Inverse der Gyrofrequenz

$$\Omega = \frac{e \cdot B}{m} .$$

Hieraus ergibt sich für die Längenskala $\rho_{\parallel}$ die Einheit

$$\rho_0 = \frac{v_0}{\Omega_0} = \frac{\sqrt{\frac{2}{m} \cdot E \cdot m}}{e \cdot B} = \frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot E}}{e \cdot B}$$

und für eine Temperatur $T = 1\text{keV}$ und ein Magnetfeld $B = 2.25\text{T}$ erhält man für Ionen

$$\rho_0 = 3.05 \cdot 10^{-3}\text{m} ,$$

sowie für Elektronen

$$\rho_0 = 7.11 \cdot 10^{-5}\text{m} .$$

Diese Längenskala muß in Relation zu der in magnetischen Koordinaten verwendeten gestellt werden. Für einen kleinen Plasmaradius von 0.50m ergibt sich dort ein

$$x_0 = 0.35\text{m}$$

und damit ein dimensionsloser Parameter

$$\lambda = \frac{\rho_0}{x_0}$$

mit einem Wert von $8.70 \cdot 10^{-3}$ für Ionen und $2.03 \cdot 10^{-4}$ für Elektronen. Da

$$\lambda \cdot \rho_{\parallel} = \frac{\lambda}{B} \cdot \sqrt{E - \mu \cdot B} \approx \frac{\lambda}{1} \cdot 1$$

in den angegebenen dimensionslosen Einheiten als zusätzlicher Term in die Hamiltonfunktion eingefügt werden muß [61], läßt sich erkennen, daß die Bedeutung dieses Terms im Vergleich mit dem integrierbaren Anteil und dem Störterm sehr klein ist. Dies ist in Abbildung 5.7 für Ionen dargestellt. Der Unterschied für Elektronen liegt nochmals um einen Faktor 45 unter dem für Ionen. Daher kann man davon ausgehen, daß in dieser Geometrie und für die hier gewählten Parameter Driften keinen Einfluß auf das Transportverhalten ausüben, solange keine parallele Dynamik für den Transport entlang der Feldlinien mitberücksichtigt wird. Kann sich jedoch das magnetische Moment μ durch Stoßprozesse ändern, kann auch durch Driften ein effektiver Transport entstehen.

5.3 Parallele Dynamik und Stöße

Solange Teilchen keine Wechselwirkung aufeinander ausüben, bewegen sie sich fast vollständig entlang der Feldlinien [38]. Die Abweichungen durch Driften sind nur gering. Bei Berücksichtigung von Stoßprozessen ändert sich dieses Verhalten jedoch in zweierlei Weise. Zum einen besteht die Möglichkeit, daß ein Teilchen sich durch den Stoß entgegen seiner ursprünglichen Richtung weiterbewegt. Tut es dies mit einem geänderten magnetischen Moment, so sind auch die Beiträge des Driftterms verschieden und das Teilchen kann von seiner ursprünglichen Bahn abweichen [13, 18]. Diese Bewegung entlang der Feldlinien wird als parallele Dynamik bezeichnet. Interessant in diesem Zusammenhang ist, daß ein Teilchentransport senkrecht zum Magnetfeld nur aufgrund der parallelen Dynamik und der Driften möglich ist.

Weiterhin bewirken Stöße aber auch eine direkte radiale Versetzung der Gyrationmittelpunkte der Teilchen, wodurch ebenfalls ein senkrechter Transport entsteht. Geht man hierbei von einer mittleren quadratischen Versetzung um $\rho^2/2$ und einer Stoßfrequenz ν aus, so ergibt sich direkt der klassische Diffusionskoeffizient

$$D_{\perp} = \frac{1}{2} \cdot \nu \cdot \frac{\rho^2}{2} = \frac{1}{4} \cdot \nu \cdot \rho^2$$

für die Diffusion der Teilchen relativ zur Bewegung der Feldlinien. In dimensionslosen Einheiten ist der Gyrationradius ρ für Ionen gerade λ . Setzt man als mittlere freie Weglänge einen Umlauf um den Torus an, so ergibt sich für

die Stoßfrequenz ν in dimensionslosen Einheiten gerade 1. Eingesetzt ergibt dies zahlenmäßig

$$D_{\perp} = \frac{1}{4} \cdot \nu \cdot \lambda^2 = 1.892 \cdot 10^{-5}$$

für den Diffusionskoeffizienten. Für ein ungestörtes Magnetfeld mit geschlossenen Magnetflächen stimmt dieser Wert mit dem in der Simulation erhaltenen überein, da in diesem Fall kein Transport durch Feldlinien stattfindet. Schaltet man nun aber die Störung des Magnetfeldes ein, so entsteht aus der Überlagerung von Teilchen- und Feldlinienbewegung ein erhöhter Transport. Kennt man den absoluten Teilchenfluß durch das System, so kann hieraus ein orts aufgelöster Diffusionskoeffizient bestimmt werden. Dieser Trick wird im folgenden Kapitel zur Bestimmung von Diffusionskoeffizienten ausgenutzt.

Geht man davon aus, daß die Teilchen sich mit thermischer Geschwindigkeit v_{th} um den Torus bewegen, so ergibt sich hieraus der Zusammenhang $v_{th} = z/t$ zwischen Länge z und Zeit t . Dies kann man ausnutzen, um einen Diffusionskoeffizienten D_m in magnetischen Koordinaten in einen Koeffizienten D_p im System der Teilchen umzurechnen:

$$D_p = \frac{\langle r^2(t) \rangle}{2 \cdot t} = \frac{\langle r^2(z) \rangle}{2 \cdot z/v_{th}} = v_{th} \cdot D_m$$

Diese wohlbekannte Umrechnung ist nötig, da in magnetischen Koordinaten der toroidale Winkel die Zeit darstellt.

Kapitel 6

Transporteigenschaften

Eines der größten Probleme in der Plasmaphysik ist, daß sich das Transportverhalten des Gesamtsystems aus mehreren einzelnen überlagerten Transportprozessen zusammensetzt. Bereits die Beschreibung jedes Transportmechanismus für sich alleine ist keine triviale Aufgabe. Um so komplizierter wird es jedoch, wenn diese gemeinsam betrachtet werden müssen.

So werden Teilchen sowohl durch Stöße als auch durch die Bewegung der Feldlinien in radialer Richtung transportiert. Wie sich dabei das Gesamtverhalten aus den einzelnen Beiträgen bestimmen läßt, ist nicht leicht zu beantworten, sondern muß in jedem Fall erst detailliert untersucht werden.

6.1 Theoretische Modelle

Zum Vergleich der mit einem symplektischen Integrator erhaltenen numerischen Daten werden nun zuerst einige Modelle beschrieben, die analytisch berechenbare Grenzfälle darstellen. Anhand dieser läßt sich die Korrektheit und Genauigkeit der verwendeten numerischen Methode überprüfen.

Dabei ist stets zu beachten, auf welchen Annahmen die einzelnen Modelle beruhen, um Unterschiede und Abweichungen mit den berechneten Daten verstehen zu können. Insbesondere ist es interessant, Modelle, die mehr als nur einen Transportprozeß berücksichtigen, mit den tatsächlich erhaltenen Werten zu vergleichen. Dies liefert einen sehr guten Einblick in die Grenzen dieser analytischen Beschreibungen für Systeme mit einem gemischten Phasenraum.

6.1.1 Langevin Gleichungen

Um den Einfluß des Magnetfeldes auf die Bewegung von Teilchen zu berechnen, gibt es verschiedene Ansätze. Eine Möglichkeit ist, das Magnetfeld nur über seine statistischen Eigenschaften zu beschreiben [55]. So läßt sich die Störung des Magnetfeldes als

$$\langle b_m(z) \cdot b_n(z') \rangle = \beta^2 \cdot \exp \left(-\frac{(z - z')^2}{2 \cdot \lambda_{\parallel}^2} \right) \cdot \delta_{mn} \quad \text{mit} \quad m, n = x, y$$

und die parallele Geschwindigkeit längs der Feldlinien als

$$\langle \eta_{\parallel}(t) \cdot \eta_{\parallel}(t') \rangle = \frac{v_{th}^2}{2} \cdot \exp(-\nu \cdot |t - t'|)$$

beschreiben. Weiterhin wird vorausgesetzt, daß es keine Korrelation zwischen der parallelen Geschwindigkeit $\eta_{\parallel}(t)$ und der Störung des Magnetfeldes $b_m(z)$ gibt. Ein solcher Ansatz führt mit den Bewegungsgleichungen für den Gyrationmittelpunkt eines Teilchens in einem Magnetfeld

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= b_x(z(t)) \cdot \eta_{\parallel}(t) + \eta_x(t) \\ \frac{dy(t)}{dt} &= b_y(z(t)) \cdot \eta_{\parallel}(t) + \eta_y(t) \\ \frac{dz(t)}{dt} &= \eta_{\parallel}(t) \end{aligned}$$

zu statistischen Differentialgleichungen, nämlich den A-, V- und SA-Langevin-Gleichungen [16, 29]. Hierbei enthalten die $\eta_n(t)$ die senkrechte Dynamik durch Stöße. Da man nur an einer Beschreibung des Transports durch das Magnetfeld interessiert ist, werden diese Terme vernachlässigt. Die Langevin-Gleichungen lassen sich unter bestimmten Annahmen analytisch lösen [5] und ergeben für den Teilchendiffusionskoeffizienten für lange Zeiten eine Abhängigkeit

$$D(t) \sim \frac{1}{\sqrt{t}}$$

und damit einen verschwindenden Diffusionskoeffizienten. Da in den hier vorgestellten Simulationen der Limes für $t \rightarrow \infty$ berechnet wurde, ist es nicht möglich die erhaltenen Werte, mit denen aus den Langevin-Gleichungen zu überprüfen [39].

Weiterhin kommt noch hinzu, daß die rein statistische Beschreibung des Magnetfeldes keine zeitlich konstante Störung beschreibt, das heißt Effekte aufgrund der statischen Natur des Feldes, können nicht auftreten. Läuft ein Teilchenensemble eine Weile entlang des Feldes und danach wieder zurück, so führt dies in den Langevin-Gleichungen nicht zu einem Zusammenlaufen der Teilchen, wie es korrekt wäre.

6.1.2 Quasilineare Theorie

Nimmt man an, daß die nichtintegrable Störung des Magnetfeldes eine große Anzahl an Moden besitzt, so finden sich an jeder Stelle im Phasenraum überlappende Resonanzen, und die Bewegung der Feldlinien wird stochastisch [14]. Der daraus resultierende Diffusionskoeffizient läßt sich quasilinear berechnen [53]. Ausgehend von der Wahrscheinlichkeitsdichte $f(\psi, \theta, t)$, welche für lange Zeiten einen stationären Zustand annimmt, läßt sich aus

$$\frac{d}{dt}f(\psi, \theta, t) = \frac{\partial}{\partial t}f(\psi, \theta, t) + \dot{\psi} \cdot \frac{\partial}{\partial \psi}f(\psi, \theta, t) + \dot{\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta}f(\psi, \theta, t) = 0$$

die Ausgangsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\psi, \theta, t) - \frac{\partial H(\psi, \theta, t)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \psi}f(\psi, \theta, t) + \frac{\partial H(\psi, \theta, t)}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta}f(\psi, \theta, t) = 0$$

für die Berechnung des Diffusionskoeffizienten gewinnen. Hierbei sei die Hamiltonfunktion

$$H(\psi, \theta, t) = H_0(\psi) + \varepsilon \cdot H_1(\psi, \theta, t)$$

aus einem integrierbaren nur von ψ abhängigen Anteil und einer nichtintegrablen Störung zusammengesetzt. Weiterhin wird die Wahrscheinlichkeitsdichte in Ordnungen von ε entwickelt

$$f(\psi, \theta, t) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \varepsilon^{\nu} \cdot f_{\nu}(\psi, \theta, t) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \varepsilon^{\nu} \cdot \left(\bar{f}_{\nu}(\psi, t) + \tilde{f}_{\nu}(\psi, \theta, t) \right)$$

und in Mittelwerte

$$\bar{f}_{\nu}(\psi, t) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta f_{\nu}(\psi, \theta, t) = \langle f_{\nu}(\psi, \theta, t) \rangle_{\theta}$$

und Fluktuationen $\tilde{f}_{\nu}(\psi, \theta, t)$ aufgeteilt. Zusätzlich definieren wir verschiedene Zeitskalen

$$t_{\nu} = \varepsilon^{\nu} \cdot t ,$$

auf denen die Dynamik des Systems stattfindet. Bis zur zweiten Ordnung in ε ergeben sich die Gleichungen:

$$\begin{aligned} \varepsilon^0: \quad & \frac{\partial f_0}{\partial t_0} + \frac{\partial H_0}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \theta} = 0 \\ \varepsilon^1: \quad & \frac{\partial f_1}{\partial t_0} + \frac{\partial f_0}{\partial t_1} + \frac{\partial H_0}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \theta} + \frac{\partial H_1}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \theta} - \frac{\partial H_1}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \psi} = 0 \\ \varepsilon^2: \quad & \frac{\partial f_2}{\partial t_0} + \frac{\partial f_1}{\partial t_1} + \frac{\partial f_0}{\partial t_2} + \frac{\partial H_0}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \theta} + \frac{\partial H_1}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \theta} - \frac{\partial H_1}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \psi} = 0 \end{aligned}$$

Zerlegt man f_0 in seinen mittleren und fluktuierenden Anteil erhält man

$$\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial t_0} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial \tilde{f}_0}{\partial t_0} + \Omega \cdot \frac{\partial \tilde{f}_0}{\partial \theta} = 0 \quad \text{mit} \quad \Omega = \frac{\partial H_0}{\partial \psi} .$$

Somit hängt $\bar{f}_0$ nicht von t_0 ab und $\tilde{f}_0$ ist eine Funktion von $(\psi, \theta - \Omega \cdot t_0, t_0 = 0, t_1, t_2, \dots)$. Um keine großen Störungen der Ordnung ε^0 zu erhalten, muß man daher als Anfangsbedingung $\tilde{f}_0 = 0$ wählen. Damit ergibt sich, daß

$$f_0 = \bar{f}_0(\psi, t_1, t_2, \dots)$$

von θ und t_0 unabhängig ist. Setzt man dieses Ergebnis in die Gleichung der Ordnung ε^1 ein und zerlegt wiederum nach gemitteltem und fluktuierendem Anteil

$$\frac{\partial \bar{f}_1}{\partial t_0} = -\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial t_1} \quad \text{und} \quad \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial t_0} + \Omega \cdot \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial \theta} = \widetilde{\frac{\partial H_1}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \psi}},$$

ergibt sich zuerst, daß $\bar{f}_0$ auch nicht von t_1 abhängen darf, da sich sonst ein linear wachsendes $\bar{f}_1$ ergeben würde. Dies würde nach kurzer Zeit die Bedingung verletzen, daß f_1 eine Ordnung in ε kleiner ist als f_0 . Die Lösung

$$\tilde{f}_1 = \int_0^{t_0} dt'_0 \frac{\partial H_1(\psi, \theta - \Omega \cdot t'_0, t_0 - t'_0)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial \psi} + \tilde{f}_1(\psi, \theta - \Omega \cdot t_0, t_0 = 0)$$

läßt sich direkt angeben, wobei der Anfangswert $\tilde{f}_1(\psi, \theta - \Omega \cdot t_0, t_0 = 0)$ im folgenden vernachlässigt werden soll. Insbesondere zeigt sich, daß $\tilde{f}_1$ nicht von t_1 abhängt. Für die Ordnung ε^2 ergibt sich über θ gemittelt:

$$\frac{\partial \bar{f}_2}{\partial t_0} + \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial t_1} + \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial t_2} - \left\langle \frac{\partial H_1}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial \psi} \right\rangle_\theta = 0$$

Geht man davon aus, daß die Störungen mit T_0 periodisch sind, so kann der Mittelwert

$$\langle X \rangle_t = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} dt' X$$

definiert werden und liefert

$$\frac{\partial \langle \bar{f}_1 \rangle_t}{\partial t_1} = -\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial t_2} + \left\langle \frac{\partial H_1}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial \psi} \right\rangle_{\theta, t}, \quad \text{wobei} \quad \frac{\partial \langle \bar{f}_2 \rangle_t}{\partial t_0} = 0$$

ist. Da die rechte Seite nicht von t_1 abhängt, muß diese verschwinden, weil sonst $\bar{f}_1$ linear mit t_1 anwachsen würde. Setzt man nun in

$$\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial t_2} = \left\langle \frac{\partial H_1}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \tilde{f}_1}{\partial \psi} \right\rangle_{\theta, t} = \frac{\partial}{\partial \psi} \left\langle \frac{\partial H_1}{\partial \theta} \cdot \tilde{f}_1 \right\rangle_{\theta, t}$$

das Ergebnis für $\tilde{f}_1$ ein, so ergibt sich die Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial \bar{f}_0}{\partial t_2} = \frac{\partial}{\partial \psi} \left(D_{QL} \cdot \frac{\partial \bar{f}_0}{\partial \psi} \right)$$

mit

$$D_{QL} = \left\langle \int_0^{t_0} dt'_0 \frac{\partial H_1(\psi, \theta - \Omega \cdot t'_0, t_0 - t'_0)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial H_1(\psi, \theta, t_0)}{\partial \theta} \right\rangle_{\theta, t}$$

als Diffusionskoeffizientem. Wertet man diese Form für das in Kapitel 5 vorgestellte System aus, so ergibt sich:

$$D_{QL} = \frac{1}{4\pi} \cdot \left(\frac{A \cdot \psi}{1 + A \cdot \psi} \right)^2 \cdot \sum_{m=4}^{11} \frac{m^2}{(1+m)^4 \cdot (n-m \cdot \Omega)^2} \cdot \dots$$

$$\dots \cdot \left[1 - \cos \left(2\pi(n-m \cdot \Omega) \right) \right] \quad \text{mit} \quad \Omega = \frac{1}{q(\psi)} = \frac{1}{1+n \cdot \psi^2}$$

Wichtig ist hierbei der Grenzfall $\omega = n - m \cdot \Omega \rightarrow 0$, da in diesem Fall eine Divergenz auftreten könnte. Bei genauer Analyse zeigt sich jedoch, daß D_{QL} endlich bleibt und mit dem Grenzwert dieser Formel übereinstimmt.

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(2\pi \cdot \omega)}{\omega^2} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{2\pi \cdot \sin(2\pi \cdot \omega)}{2 \cdot \omega} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{(2\pi)^2 \cdot \cos(2\pi \cdot \omega)}{2} = 2\pi^2$$

6.1.3 Modell von Rechster und Rosenbluth

Auf der vorherigen Beschreibung aufbauend haben Rechster und Rosenbluth [41] die Dynamik eines Systems von Teilchen in einem solchen Magnetfeld

untersucht. Unter der Annahme, daß die Feldlinien lokal exponentiell auseinanderlaufen

$$r(z) = r_0 \cdot \exp(z/L_K) \quad \text{mit} \quad L_K = \frac{1}{\lambda_{Lj}}$$

und daß die Bewegung insgesamt stochastisch ist mit dem quasilinearen Diffusionskoeffizienten D_{QL} , ergeben sich verschiedene Bereiche für den Gesamttransport. Interessant ist dabei, wie sich die Feldlinienbewegung mit der parallelen und senkrechten Dynamik der Teilchen überlagert.

Für den kollisionsfreien Fall ergibt sich

$$\langle r^2(t) \rangle = 2 \cdot D_{QL} \cdot z(t) = 2 \cdot D_{QL} \cdot v_{th} \cdot t ,$$

wie bereits in Kapitel 5 gezeigt. Dieses Ergebnis ist auch noch gültig, wenn die mittlere freie Weglänge l_f der Teilchen für Stöße wesentlich größer ist, als die Korrelationslänge der Feldlinien L_K . In diesem Fall beeinflussen Stöße das Transportverhalten nicht wesentlich.

Betrachtet man dagegen den Fall häufiger Kollisionen in der parallelen Dynamik $l_f \ll L_K$, so reduziert sich der effektive senkrechte Transport, weil die Teilchen nicht mehr mit konstanter Geschwindigkeit entlang der Feldlinien laufen. Stattdessen diffundieren sie mit

$$\langle z^2(t) \rangle = 2 \cdot D_{\parallel} \cdot t$$

und man erhält

$$\langle r^2(t) \rangle = 2 \cdot D_{QL} \cdot \sqrt{2 \cdot D_{\parallel} \cdot t}$$

ein subdiffusives Verhalten, entsprechend dem Ergebnis der Langevingleichungen. Erlaubt man schließlich auch Kollisionen mit Versetzungen senkrecht zum Magnetfeld $D_{\perp} > 0$ und häufige Kollisionen $l_f \ll L_K$, so kann man die senkrechte Diffusion als kontinuierlichen Prozeß betrachten:

$$\langle r^2(t) \rangle = 2 \cdot D_{\perp} \cdot t$$

Über die Zeitabhängigkeit der Diffusion in paralleler Richtung kann man dies umschreiben in

$$\langle r^2(t) \rangle = 2 \cdot D_{\perp} \cdot \frac{\langle z^2(t) \rangle}{2 \cdot D_{\parallel}} = \frac{D_{\perp}}{D_{\parallel}} \cdot \langle z^2(t) \rangle$$

oder mit $r - r_0 = \sqrt{\langle r^2(t) \rangle}$ und $z = \sqrt{\langle z^2(t) \rangle}$ in die Form

$$r - r_0 = \sqrt{\frac{D_{\perp}}{D_{\parallel}}} \cdot z .$$

Diese Beziehung gilt nur für $z \ll L_K$, da für größere Werte von z das exponentielle Auseinanderlaufen der Feldlinien die Bewegung dominiert. Da r_0 ein freier Parameter ist, kann dieser so bestimmt werden, daß sich für das exponentielle Auseinanderlaufen der Feldlinien im Limes für $z \rightarrow 0$ gerade der Zusammenhang für die Teilchendiffusion durch Stöße ergibt.

$$r = r_0 \cdot \exp(z/L_K) = r_0 + r_0 \cdot \frac{z}{L_K} + \mathcal{O}(z^2)$$

oder umgeformt

$$r - r_0 = r_0 \cdot \frac{z}{L_K} \equiv \sqrt{\frac{D_{\perp}}{D_{\parallel}}} \cdot z \quad \text{und daraus} \quad r_0 = L_K \cdot \sqrt{\frac{D_{\perp}}{D_{\parallel}}}$$

Bildlich gesprochen bedeutet dies, daß die Teilchenstöße für kleine z ein lineares Auseinanderlaufen der Anfangsbedingungen bewirken, welches dann in ein exponentielles übergeht, sobald der Abstand $r - r_0$ zweier Feldlinien groß genug geworden ist. Die Kollisionen liefern also die Startreaktion, durch die identische Startpositionen voneinander getrennt werden ($z < L_K$), welche dann auf einer größeren Längenskala ($z > L_K$) exponentiell auseinanderlaufen.

Über diesen Zusammenhang kann nun berechnet werden, nach welcher Entfernung L_{RR} längs einer Feldlinie zwei ursprünglich identische Anfangsbedingungen gerade um die senkrechte Korrelationslänge $L_{\perp}$ der Magnetfeldstörungen getrennt werden.

$$L_{\perp} = L_K \sqrt{\frac{D_{\perp}}{D_{\parallel}}} \cdot \exp(L_{RR}/L_K) \quad \text{liefert} \quad L_{RR} = L_K \cdot \ln \left[\frac{L_{\perp}}{L_K} \cdot \sqrt{\frac{D_{\parallel}}{D_{\perp}}} \right]$$

Aus der parallelen Teilchendynamik läßt sich die Sprungzeit

$$t_{RR} = \frac{L_{RR}^2}{D_{\parallel}}$$

abschätzen, nach der ein Teilchen von einer Feldlinie zur nächsten befördert wird. Dabei beträgt die Schrittweite

$$\langle (\Delta r)^2 \rangle = D_{QL} \cdot L_{RR}$$

für einen solchen Sprung gerade die Entfernung, um die Feldlinien im Mittel über die Entfernung L_{RR} auseinanderlaufen, und man erhält schließlich

$$D_{RR} = \frac{\langle (\Delta r)^2 \rangle}{t_{RR}} = \frac{D_{QL} \cdot L_{RR}}{L_{RR}^2/D_{\parallel}} = D_{QL} \cdot \frac{D_{\parallel}}{L_{RR}}.$$

Der Teilchentransport (welcher der Simulation mit paralleler Dynamik entspricht) im Vergleich zum Feldlinientransport (welcher der Simulation ohne parallele Dynamik entspricht) ist also um einen Faktor

$$\frac{D_{RR}}{D_{QL}} = \frac{D_{\text{mit } \parallel\text{-Dynamik}}}{D_{\text{ohne } \parallel\text{-Dynamik}}} = \frac{l_f}{L_{RR}} \quad \text{mit} \quad L_{RR} = L_K \cdot \ln \left(\frac{L_{\perp}}{L_K} \cdot \sqrt{\frac{D_{\parallel}}{D_{\perp}}} \right)$$

unterdrückt. Setzt man die in der Simulation verwendeten Werte für diese Größen ein, so ergibt sich

$$\frac{D_{\text{mit } \parallel\text{-Dynamik}}}{D_{\text{ohne } \parallel\text{-Dynamik}}} = l_f \cdot \left[L_K \cdot \ln \left(16.133 \cdot l_f \cdot \frac{L_{\perp}}{L_K} \right) \right]^{-1},$$

wobei $L_K = 1/\lambda_{L_j}$ ist, dem Ljapunovexponenten des Systems. Dieser kann numerisch für das gegebene System bestimmt und eingesetzt werden.

Vergleicht man die Ergebnisse einer Simulation mit und ohne paralleler Dynamik, so sollte daher der radiale Teilchentransport *ohne* Berücksichtigung der parallelen Dynamik deutlich *höher* sein.

6.2 Feldlinientransport

Nach der Beschreibung der verschiedenen rein analytischen Ansätze, soll nun zuerst der Transport von Feldlinien untersucht werden. Für den Fall einer starken Störung erwartet man dabei stochastisches Verhalten [44] im Bereich der gebrochenen Flußflächen. Da das System aber weiterhin ungebrochene Flußflächen aufweist, muß von einer Diffusion in einem begrenzten System, wie in Kapitel 2 beschrieben, ausgegangen werden. Ist die Störung jedoch noch nicht stark genug, um einen ausreichenden Überlapp der vorhandenen Resonanzen zu erzeugen, so ist das Systemverhalten komplex und weicht signifikant von einem stochastischen ab [36, 64].

6.2.1 Topologie des Systems

Betrachtet man das System im Detail, so kann man einige sehr interessante Aussagen über die Topologie ableiten. So kann die Hamiltonfunktion um die Stellen der einzelnen Resonanzen in der Energie entwickelt und damit auf die Form eines physikalischen Pendels transformiert werden [20]. Dies erlaubt die Berechnung von Inselgrößen in Abhängigkeit der Stärke der Störung. Hieraus läßt sich wiederum der Überlapp der Inseln und damit auch eine Abschätzung des Transportverhaltens gewinnen [45, 25].

Betrachtet man das System

$$H = \int_{-\psi}^{\psi} d\psi' \, \omega(\psi') + \varepsilon \cdot \sum_{m,n} V_{mn}(\psi) \cdot \cos(m \cdot \theta - n \cdot t)$$

mit integrierbarem Anteil und Störung, so läßt sich zuerst die Position der Resonanzen aus der Bedingung berechnen, daß

$$m \cdot \theta - n \cdot t = \text{const.}$$

ist. Im O-Punkt der Resonanz verschwindet die Störung und es ergibt sich, daß

$$\dot{\theta} = \omega(\psi) \quad \text{mit} \quad \dot{\psi} = 0$$

ist. Leitet man die Resonanzbedingung einmal nach der Zeit ab und setzt für $\dot{\theta}$ ein, so erhält man

$$m \cdot \omega(\psi_{mn}) - n = 0 \quad \text{oder} \quad \omega(\psi_{mn}) = \frac{n}{m},$$

woraus sich für gegebenes n und m durch Umkehrung der Funktion $\omega(\psi)$ der ψ -Wert der Resonanz ergibt. Um nun die Breite der zu jeder Resonanz gehörenden Insel zu berechnen, muß das System mit der erzeugenden Funktion

$$F(\psi, q, t) = (\psi - \psi_{mn}) \cdot \frac{q + n \cdot t}{m} + H_0(\psi_{mn}) \cdot t$$

auf die neuen Koordinaten p und q transformiert werden. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} p &= \frac{\partial F}{\partial q} = \frac{\psi - \psi_{mn}}{m} = \frac{\Delta\psi}{m} \\ \theta &= \frac{\partial F}{\partial \psi} = \frac{q + n \cdot t}{m} \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} p &= \frac{\psi - \psi_{mn}}{m} \\ q &= m \cdot \theta - n \cdot t \end{aligned}$$

für die neuen Koordinaten. Mit der partiellen Zeitableitung

m	ψ_m	Δ_m	r_m	Δr_m
4	0.333	0.084	0.816	0.103
5	0.471	0.084	0.971	0.086
6	0.577	0.083	1.075	0.077
7	0.667	0.082	1.155	0.071
8	0.745	0.082	1.221	0.067
9	0.816	0.081	1.278	0.064
10	0.882	0.081	1.328	0.061
11	0.943	0.080	1.373	0.058

Tabelle 6.1: Position und Ausdehnung der Inseln für $\varepsilon = 0.10$ in magnetischen und kartesischen Koordinaten

$$\frac{\partial F}{\partial t} = (\psi - \psi_{mn}) \cdot \frac{n}{m} + H_0(\psi_{mn}) = n \cdot p + H_0(\psi_{mn})$$

und der Konstanten

$$M = \left| \left[m^2 \cdot \frac{\partial \omega(\psi)}{\partial \psi} \right]_{\psi=\psi_{mn}} \right|^{-1}$$

kann nun die Hamiltonfunktion gemäß

$$H_r(p, q) = H(\psi, \theta, t) - \frac{\partial F(\psi, q, t)}{\partial t}$$

transformiert werden. Zuvor muß jedoch noch der integrable Anteil H_0 um die Resonanzstelle ψ_{mn} entwickelt werden:

$$\begin{aligned} H_0(\psi) &\approx H_0(\psi_{mn}) + \Delta\psi \cdot \frac{\partial H_0}{\partial \psi} \Big|_{\psi=\psi_{mn}} + \frac{\Delta\psi^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 H_0}{\partial \psi^2} \Big|_{\psi=\psi_{mn}} = \\ &= H_0(\psi_{mn}) + \Delta\psi \cdot \omega(\psi_{mn}) + \frac{\Delta\psi^2}{2} \cdot \frac{\partial \omega(\psi)}{\partial \psi} \Big|_{\psi=\psi_{mn}} = \\ &= H_0(\psi_{mn}) + m \cdot p \cdot \frac{n}{m} + \frac{m^2 \cdot p^2}{2} \cdot \frac{1}{m^2 \cdot M} = H_0(\psi_{mn}) + n \cdot p + \frac{p^2}{2 \cdot M} \end{aligned}$$

$m \leftrightarrow m'$	s				
	$\varepsilon = 0.02$	$\varepsilon = 0.04$	$\varepsilon = 0.06$	$\varepsilon = 0.08$	$\varepsilon = 0.10$
$4 \leftrightarrow 5$	0.272	0.385	0.471	0.544	0.608
$5 \leftrightarrow 6$	0.352	0.498	0.609	0.704	0.787
$6 \leftrightarrow 7$	0.414	0.586	0.718	0.829	0.927
$7 \leftrightarrow 8$	0.467	0.661	0.809	0.934	1.045
$8 \leftrightarrow 9$	0.513	0.725	0.888	1.026	1.147
$9 \leftrightarrow 10$	0.554	0.783	0.959	1.107	1.238
$10 \leftrightarrow 11$	0.590	0.835	1.022	1.180	1.320

Tabelle 6.2: Überlapp der Resonanzen für verschieden starke Störungen

Hieraus ergibt sich die bekannte Form des physikalischen Pendels

$$\begin{aligned}
 H_r(p, q, t) &\approx H_0(\psi_{mn}) + n \cdot p + \frac{p^2}{2 \cdot M} + \varepsilon \cdot V_{mn}(\psi_{mn}) \cdot \cos(q) - n \cdot p - H_0(\psi_{mn}) = \\
 &= \frac{p^2}{2 \cdot M} + \varepsilon \cdot V_{mn}(\psi_{mn}) \cdot \cos(q)
 \end{aligned}$$

für die transformierte Hamiltonfunktion. Dabei ist noch zu beachten, daß alle Moden bis auf die betrachtete (m, n) vernachlässigt werden. Weiterhin läßt sich nun auch direkt der ψ -Wert des Maximums der Separatrix aus der Hamiltonfunktion berechnen

$$\frac{p^2}{2 \cdot M} = \frac{\Delta\psi^2}{2 \cdot m^2 \cdot M} = \varepsilon \cdot V_{mn}(\psi_{mn})$$

und nach der Größe des ψ -Intervalls aufgelöst:

$$\Delta_{mn} = 2 \cdot \Delta\psi = 2 \cdot m \cdot \sqrt{2 \cdot \varepsilon \cdot M \cdot V_{mn}(\psi_{mn})}$$

Setzt man die in Kapitel 5 verwendeten Werte des Modellsystems ein und berücksichtigt, daß nur eine n -Mode mit $n = 3$ auftritt, so ergeben sich die Inselbreiten zu:

$$\Delta_m = 2 \cdot \frac{1 + 3 \cdot \psi_m^2}{m + 1} \cdot \sqrt{\frac{1}{3} \cdot \frac{\varepsilon}{1 + \psi_m}}$$

Die sich ergebenden Größen sind in Tabelle 6.1 für eine Störung mit $\varepsilon = 0.1$ zusammengefaßt.

Aus Position und Breite der Inseln läßt sich berechnen, ob einzelne Resonanzen im Phasenraum getrennte Gebiete darstellen oder sich überlappen. Der als Stochastizität bezeichnete Parameter

$$s = \frac{\Delta_{mn} + \Delta_{m'n'}}{2 \cdot |\psi_{mn} - \psi_{m'n'}|}$$

ergibt sich hierbei direkt aus den soeben berechneten Größen [63]. Dabei bedeutet ein $s < 1$, daß die beteiligten Resonanzen nicht überlappen, während $s \geq 1$ eine Überschneidung der Phasenraumgebiete der Inseln anzeigt.

In Tabelle 6.2 sind die mit dieser Formel berechneten Werte der Stochastizität für verschiedene Störungen dargestellt. Es fällt auf, daß in Poincarédarstellungen des Phasenraums (vergleiche Abbildung 5.5) bereits viel früher ein Überlapp der Resonanzen zu beobachten ist, als die Werte aus Tabelle 6.2 vermuten lassen würden. Die berechneten Inselbreiten sind also kleiner als in Wirklichkeit. Dies ist auf die Taylorentwicklung der Energie um die Resonanzstelle zurückzuführen.

6.2.2 Ljapunovexponenten

Durch Berechnung der Ljapunovexponenten [7, 8] und durch Vergleich mit einem analytischen Diffusionsmodell können die wesentlichen statistischen Eigenschaften des Systems bestimmt werden.

Betrachtet man zuerst die numerisch berechneten Ljapunovexponenten in Abbildung 6.1, so sieht man, daß ab einem $\varepsilon \approx 0.1$ ein Überlapp von Resonanzen stattfindet. Dies geschieht viel früher als aufgrund der Taylorentwicklung der Energie angenommen. Mit steigendem ε breitet sich der Bereich überschneidender Resonanzen zu kleineren ψ -Werten aus, wie auch in der topologischen Abschätzung vorhergesagt (siehe Tabelle 6.2).

Man erkennt weiterhin, daß der Ljapunovexponent im Bereich der Resonanzen nur schwach von ψ abhängt. Die Einbrüche kennzeichnen Stellen im Phasenraum, welche noch Inseln oder deren Überreste enthalten. Da über mehrere Startbedingungen gemittelt wurde, ergibt sich so ein kleinerer Ljapunovexponent, weil in diesen noch nicht stochastisierten Gebieten $\lambda = 0$

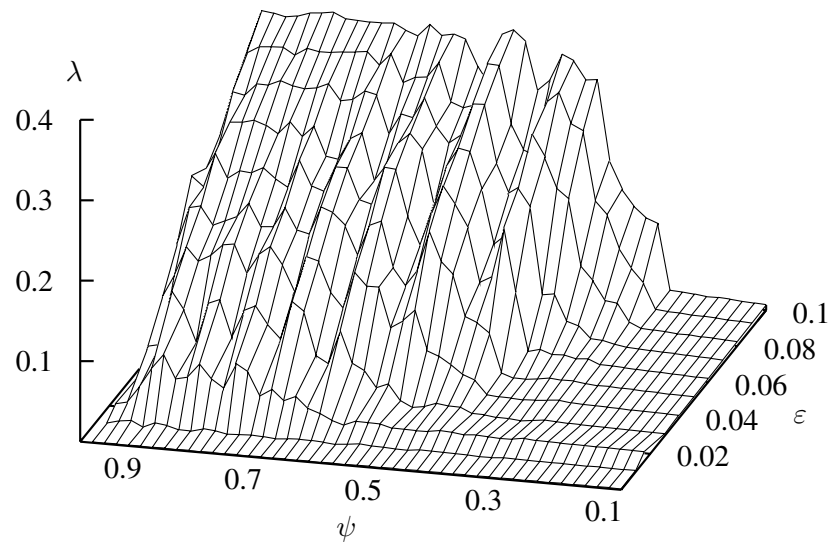


Abbildung 6.1: Numerisch berechnete Ljapunovexponenten des Modells für verschiedene Stärken der Störung

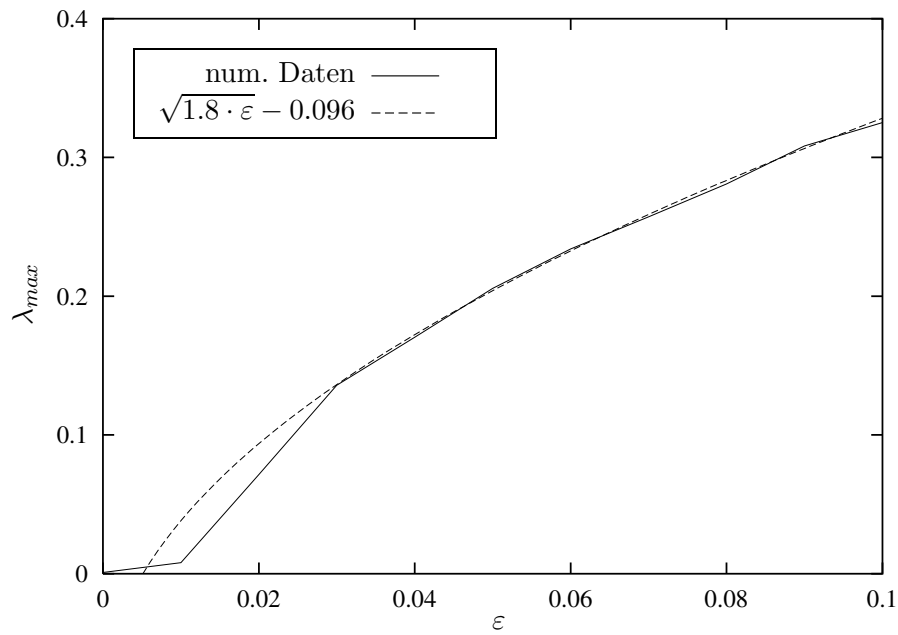


Abbildung 6.2: Maximaler Ljapunovexponent des Modellsystems als Funktion der Stärke der Störung

ist. Es macht daher Sinn nur den maximalen Ljapunovexponenten für ein gegebenes ε zu betrachten. Dies ist in Abbildung 6.2 aufgetragen.

Interessanterweise stimmt der Verlauf der Kurve sehr gut mit einer Wurzelfunktion überein, wobei die Abweichung bei kleinen ε mit der bereits erwähnten Mittelung über mehrere Anfangsbedingungen zusammenhängt. Für diese kleinen Werte von ε gibt es noch keine ausgedehnten stochastischen Gebiete im Phasenraum, so daß man stets auch Anfangsbedingungen mit $\lambda = 0$ zur Mittelung auswählt.

Aber auch für große Werte von ε ist weiterhin eine deutliche Strukturierung des Phasenraums zu erkennen. Es gibt also Gebiete, in denen Feldlinien sehr schnell transportiert werden, und Sandere Bereiche, in denen kein Transport stattfindet [35, 54]. In den stochastischen Gebieten des Phasenraums ist der Ljapunovexponent eine wichtige Größe zur quantitativen Abschätzung des Transports, da er die Inverse der Korrelationslänge für Feldlinien beschreibt.

6.2.3 Begrenzte Diffusion

Neben der Berechnung der Ljapunovexponenten wird die numerisch berechnete Verteilung der Feldlinien auch mit der analytischen für begrenzte Diffusion mittels eines Kolmogorov-Smirnov-Tests verglichen, um eine Aussage über die Gleichheit der Verteilungen machen zu können.

Dabei ergibt sich lediglich für die Anfangswerte $\psi_0 = 0.8$ und $\psi_0 = 0.9$ ein nicht verschwindender Wert der Größe $Q_{KS}(\lambda)$. Diese Größe beschreibt die Wahrscheinlichkeit, daß die beobachtete Differenz mit der Hypothese in Einklang steht, daß beide Verteilungen gleich sind. Für die übrigen Startwerte von ψ_0 ist der Wert des maximalen Abstands der beiden Verteilungen aufgetragen. Für einen maximalen Abstand von 0.064 ergibt sich für die betrachteten Systeme nur noch ein $Q_{KS}(\lambda)$ von einem Prozent. Für größere Abstände fällt der Wert von $Q_{KS}(\lambda)$ schnell auf Null ab.

Erwartungsgemäß ergibt sich für Bereiche des Phasenraums, die Inseln oder deren Überreste enthalten, eine sehr schlechte Übereinstimmung (Abbildungen 6.3, 6.4 und 6.5). In diesen Bereichen ist eine statistische Beschreibung im Rahmen des vorgestellten Modells nicht möglich. Dies bedeutet auch, daß Modelle, die nur statistische Eigenschaften von Feldlinien berücksichtigen, in diesem Bereich des Phasenraums keine Gültigkeit besitzen können.

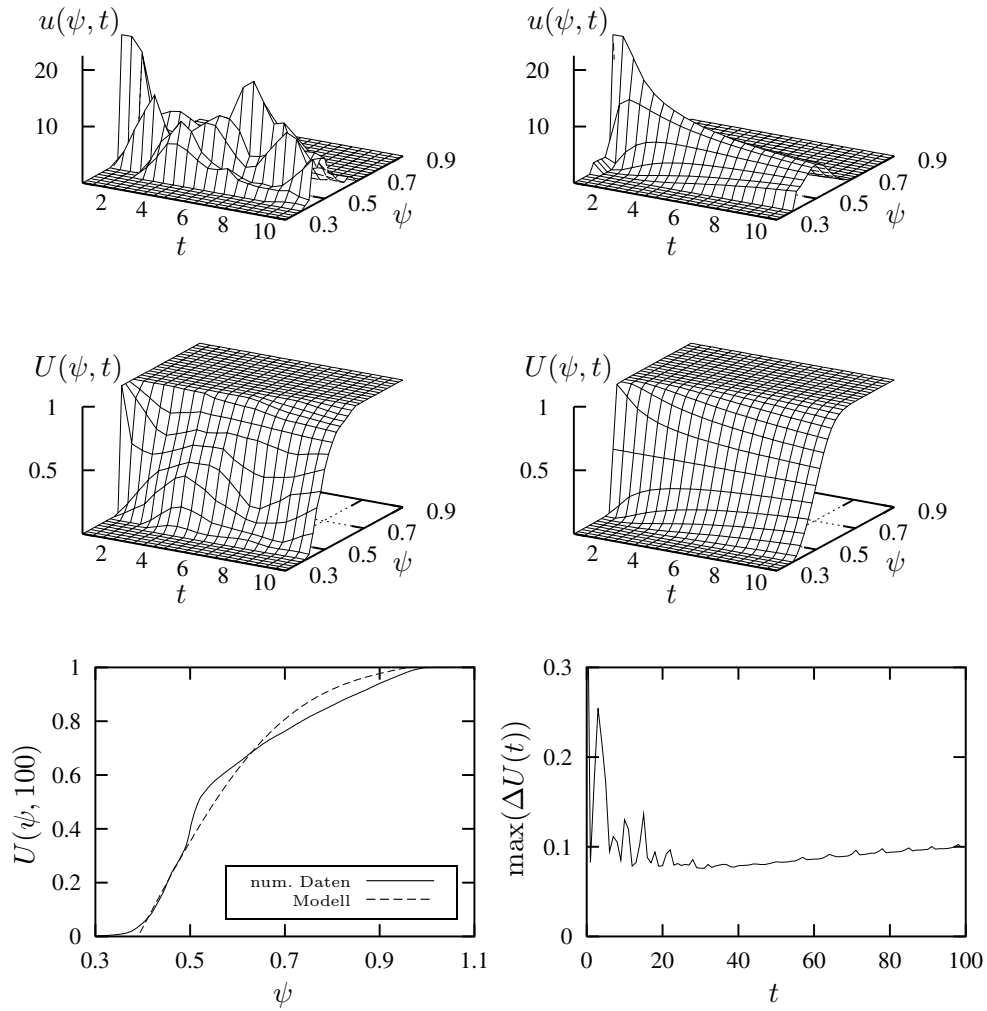


Abbildung 6.3: Vergleich zwischen numerischen Daten (links) für die Bewegung der Feldlinien und analytischem Modell (rechts) für $\psi_0 = 0.5$. Für das analytische Modell wurden die Werte $D = 2.2 \cdot 10^{-4}$ und $\Delta = 0.57$ verwendet.

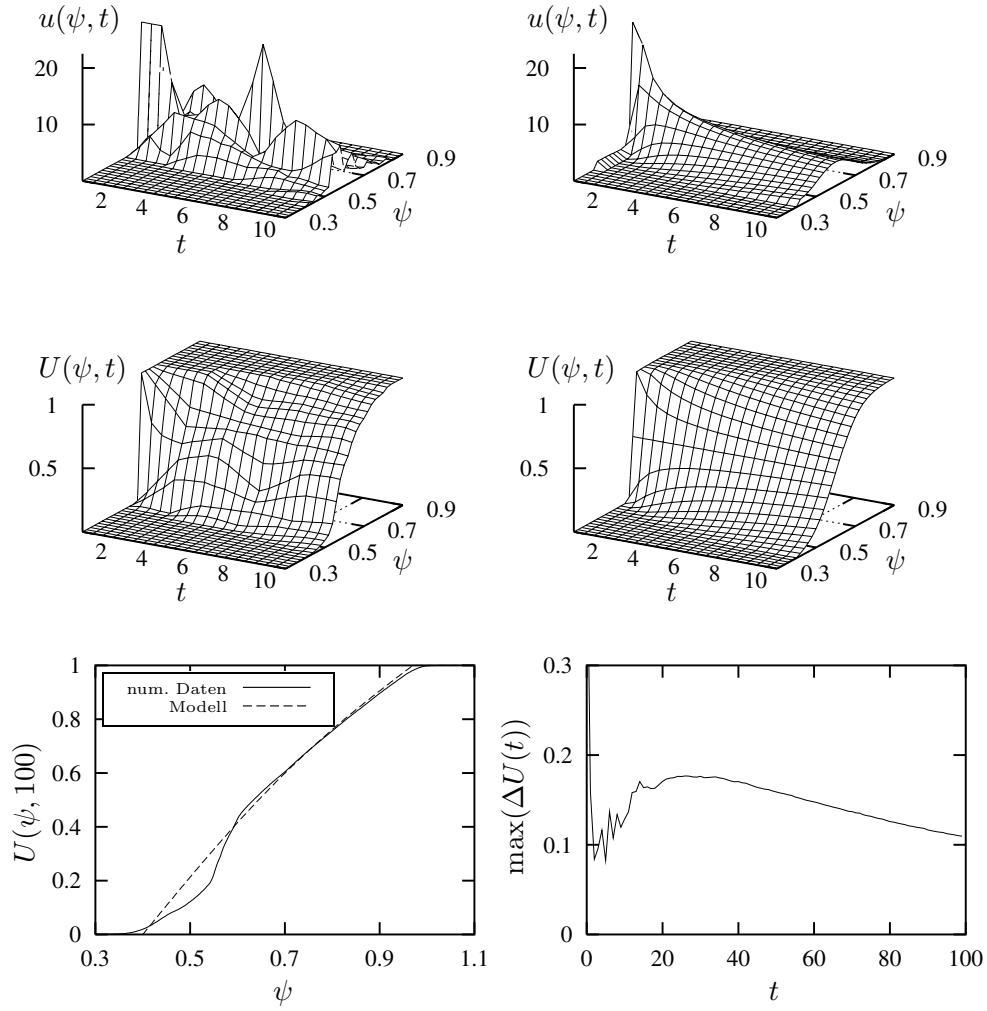


Abbildung 6.4: Vergleich zwischen numerischen Daten (links) für die Bewegung der Feldlinien und analytischem Modell (rechts) für $\psi_0 = 0.6$. Für das analytische Modell wurden die Werte $D = 3.5 \cdot 10^{-4}$ und $\Delta = 0.57$ verwendet.

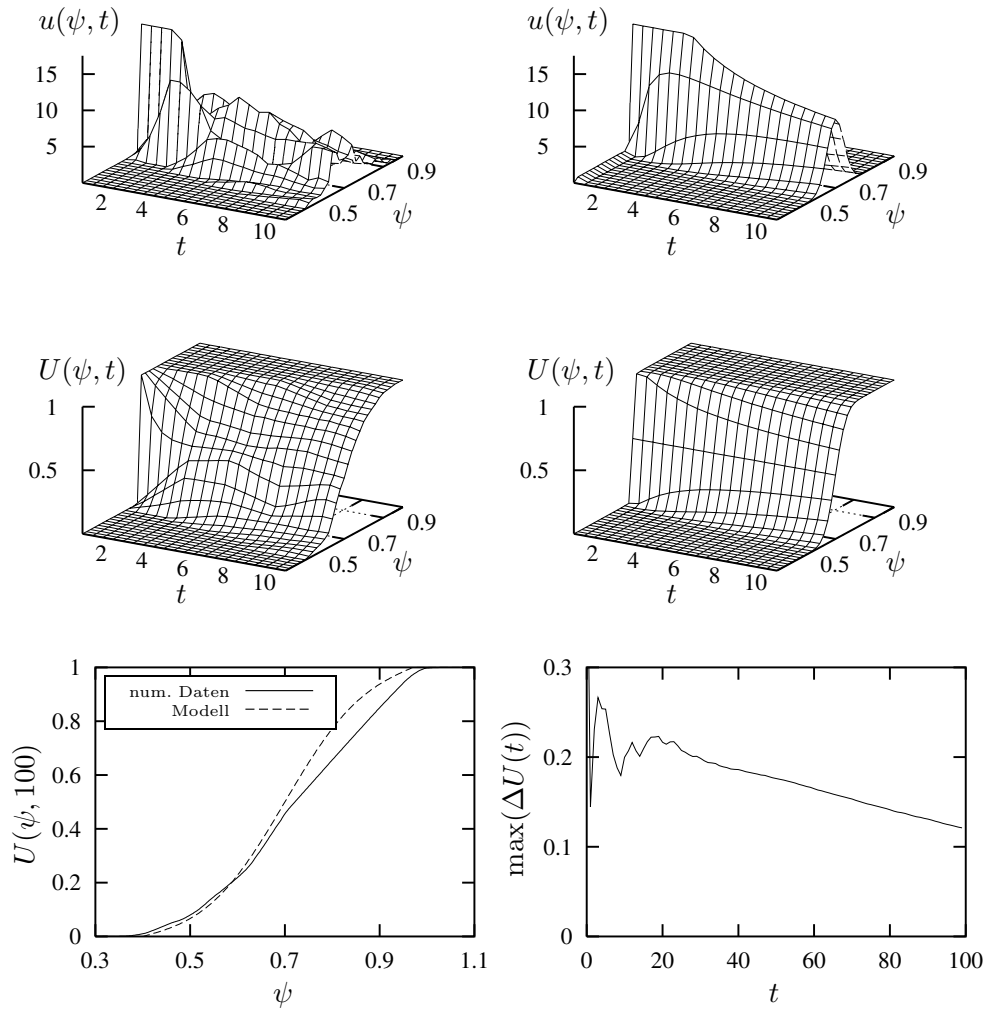


Abbildung 6.5: Vergleich zwischen numerischen Daten (links) für die Bewegung der Feldlinien und analytischem Modell (rechts) für $\psi_0 = 0.7$. Für das analytische Modell wurden die Werte $D = 9.0 \cdot 10^{-5}$ und $\Delta = 0.57$ verwendet.

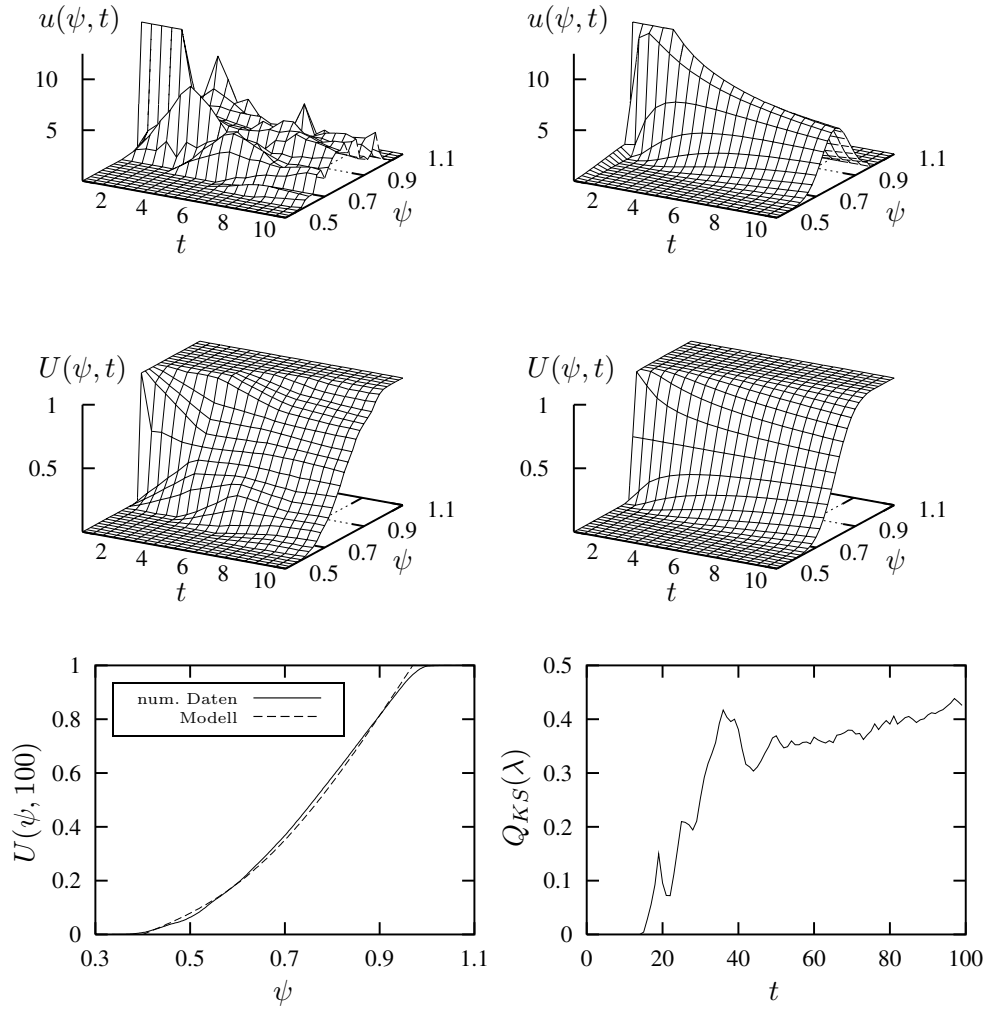


Abbildung 6.6: Vergleich zwischen numerischen Daten (links) für die Bewegung der Feldlinien und analytischem Modell (rechts) für $\psi_0 = 0.8$. Für das analytische Modell wurden die Werte $D = 2.5 \cdot 10^{-4}$ und $\Delta = 0.57$ verwendet.

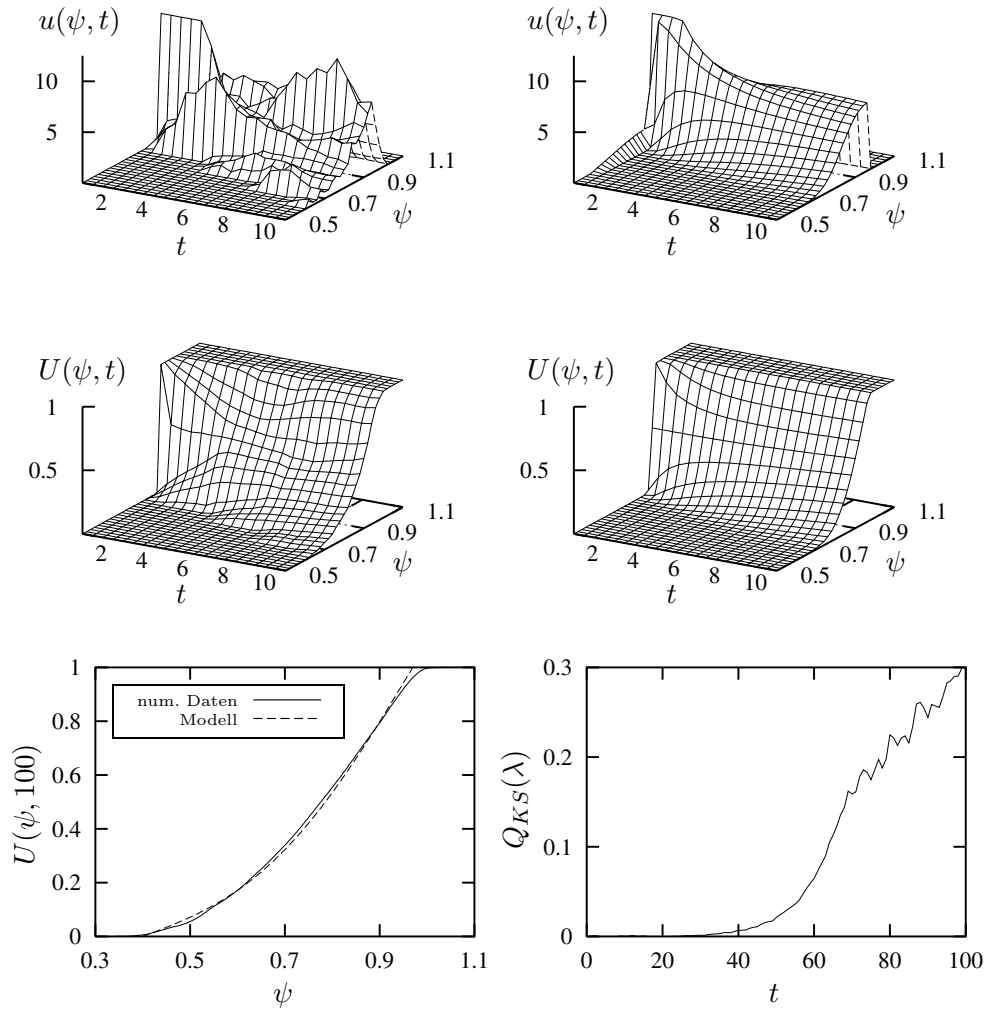


Abbildung 6.7: Vergleich zwischen numerischen Daten (links) für die Bewegung der Feldlinien und analytischem Modell (rechts) für $\psi_0 = 0.9$. Für das analytische Modell wurden die Werte $D = 3.5 \cdot 10^{-4}$ und $\Delta = 0.57$ verwendet.

Weiterhin sieht man aus den Abbildungen 6.6 und 6.7 sehr deutlich den Übergang von einem deterministischen nicht diffusiven System auf kleinen Zeitskalen zu einem diffusiven für lange Zeiten. Auch dies entspricht der Vorstellung, daß die Feldlinien für kurze Zeiten stark korreliert sind. Erst wenn sie sich weit genug voneinander im Phasenraum entfernt haben, können sie ein voneinander unabhängiges (und damit stochastisches) Verhalten aufweisen.

Typische Werte liegen bei diesem System in der Größenordnung von mehr als 40 Umläufen um den Torus. Somit sollten Teilchen in einem Plasma dieser Art keine diffusive Bewegung der Feldlinien spüren, da diese typischerweise einmal pro Umlauf durch Kollisionen von ihrer ursprünglichen Bahn gestreut werden. Sie laufen also nie lange genug ungestört entlang dem Magnetfeld, als daß die Bewegung der Feldlinien für sie stochastisch erscheinen könnte.

Erst für weit höhere Werte des Störterms kann man einen ausreichenden Überlapp der Resonanzen erwarten, so daß das gesamte System einer stochastischen Beschreibung zugänglich wird [9]. Da die hier gewählten Größenordnungen aber in etwa den im Experiment gefundenen entsprechen, muß man davon ausgehen, daß nur eine direkte Beschreibung von Teilchen im Magnetfeld die gemessenen Flüsse korrekt beschreiben kann. Transportuntersuchungen nur auf Basis der Bewegung der Feldlinien sind dafür nicht die geeignete Methode.

Auch fällt auf, daß es nicht möglich war, die für verschiedene Anfangsbedingungen erhaltenen Verteilungen, mit einem einheitlichen Diffusionskoeffizienten zu beschreiben. Da das analytische Modell keine Ortsabhängigkeit des Diffusionskoeffizienten vorsieht, hätte für alle Anfangswerte eigentlich der gleiche Wert verwendet werden müssen, da alle Anfangswerte aus einem zusammenhängenden Bereich des Phasenraums stammen. Dieser deutliche Hinweis auf einen ortsabhängigen Diffusionskoeffizienten wird in der nun folgenden Beschreibung des Systems im Teilchenbild ebenfalls bestätigt werden.

6.3 Teilchentransport

Die Problematik in einem System aus gebrochenen und unebrochenen Flußflächen Transportgrößen zu bestimmen, läßt sich elegant umgehen, wenn man zusätzlich den Einfluß von Stößen berücksichtigt und damit einen Transport über das gesamte System ermöglicht. Für den Fall ungestörter Flußflächen

ergibt sich ein einfacher diffusiver Transport wie bereits in 6.3.1 beschrieben. Schaltet man nun die Störung ein, so ergibt sich ein zusätzlicher Transportbeitrag durch die Bewegung der Feldlinien.

6.3.1 Klassische Transporttheorie

Die einfachste Vorstellung ist ein System mit geschlossenen magnetischen Flußflächen, bei dem der gesamte radiale Transport durch Teilchenstöße hervorgerufen wird. Definiert man den Rand des Plasmas an der Stelle $\psi = 1$ und setzt alle Testteilchen, die diese Grenze überschreiten, wieder in der Mitte des Plasmas $\psi = 0$ aus, so erhält man nach einer Einschwingphase einen stationären Teilchenfluß Γ_∞ durch das System.

Ebenso ergibt sich ein stationäres Dichteprofil $u(r)$. Hierbei ist jedoch die Geometrie des Problems zu beachten. Die Teilchen werden in der Mitte eines Zylinders ausgesetzt und diffundieren dann durch Stöße zur Außenwand. Der aufsummierte radiale Fluß durch die dazwischen liegenden Zylinderoberflächen ist zwar konstant, jedoch ergibt sich aufgrund der mit dem Radius zunehmenden Fläche ein nach außen abnehmender Fluß pro Oberflächenelement. Man erhält

$$\Gamma(r) = \frac{\Gamma_\infty}{2 \cdot \pi \cdot r}$$

und ebenso für das Verhältnis der poloidal aufsummierten Dichte

$$\bar{u}(r) = 2 \cdot \pi \cdot r \cdot u(r) \quad .$$

Diese kumulative Dichte $\bar{u}(r)$ ist der aus der Simulation erhaltene Wert, wohingegen die tatsächliche Dichte $u(r)$ ist, welche in die Diffusionsgleichung eingesetzt werden muß. Dieser Unterschied ergibt sich, weil die Diffusion in einem zweidimensionalen euklidischen Raum erfolgt, die Darstellung aber in Zylinderkoordinaten nach Summation über die poloidale Komponente. Die Stöße finden also in einer anderen Geometrie statt als die später berücksichtigte Bewegung der Magnetfeldlinien.

Setzt man dies nun in den Ansatz

$$\Gamma(r) = \frac{\Gamma_\infty}{2 \cdot \pi \cdot r} = -D \cdot \frac{du(r)}{dr}$$

für den Teilchenfluß in einem diffusivem System ein, so erhält man die Lösung

$$u(r) = -\frac{\Gamma_\infty}{2 \cdot \pi \cdot D} \cdot \ln\left(\frac{r}{r_0}\right)$$

und für die poloidal integrierte Dichte

$$\bar{u}(r) = -\frac{\Gamma_\infty \cdot r_0}{D} \cdot \left(\frac{r}{r_0}\right) \cdot \ln\left(\frac{r}{r_0}\right) \quad ,$$

wobei $r_0 = \sqrt{2 \cdot \psi_0} = \sqrt{2}$ für $\psi_0 = 1$ ist. Die kumulierte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\bar{U}(r) = \int_0^r dr' \bar{u}(r') = \frac{\Gamma_\infty \cdot r_0^2}{4 \cdot D} \cdot \left(\frac{r}{r_0}\right)^2 \cdot \left(1 - 2 \cdot \ln\left(\frac{r}{r_0}\right)\right)$$

liefert mit der Bedingung $\bar{U}(r_0) = 1$ für die Normierung der Wahrscheinlichkeitsdichte auch direkt den Zusammenhang

$$\Gamma_\infty = D \cdot \frac{4}{r_0^2} = 2 \cdot D \quad \text{für} \quad r_0 = \sqrt{2}$$

zur Berechnung des Flusses Γ_∞ zum Diffusionskoeffizienten D . Setzt man in dieser Formel $D = 1.892 \cdot 10^{-5}$, so ergibt sich ein Fluß $\Gamma_\infty = 3.784 \cdot 10^{-5}$. Dieser nur durch Stöße hervorgerufene Fluß Γ_∞ soll im folgenden als Referenzfluß

$$\Gamma_0 = 3.784 \cdot 10^{-5}$$

bezeichnet werden, sowie

$$D_0 = \frac{\Gamma_0}{2} = 1.892 \cdot 10^{-5}$$

als Referenzdiffusionskoeffizient. Aus der numerischen Simulation ergibt sich ein Wert von $\Gamma_{\text{numerisch}} \approx 3.730 \cdot 10^{-5}$ in guter Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage.

6.3.2 Räumlich aufgelöster Diffusionskoeffizient

Der resultierende gesamte Teilchenfluß durch das System ist nur ein recht grobes Maß für den Einfluß des Feldlinientransportes auf den Teilchentransport. Es wäre daher schön, wenn man eine detailliertere Aussage machen könnte, wo der Transport in welcher Stärke beeinflusst wird. Interessanterweise läßt sich ein solcher räumlich aufgelöster Diffusionskoeffizient aus dem Dichteprofil und der Tatsache bestimmen, daß der radiale Gesamtfluß konstant ist.

Ausgehend von

$$\Gamma(r) = \frac{\Gamma_{\infty}}{2 \cdot \pi \cdot r} = -D \cdot \frac{du(r)}{dr}$$

läßt sich durch Auflösen nach dem Diffusionskoeffizienten die Beziehung

$$D(r) = -\frac{\Gamma_{\infty}}{2 \cdot \pi \cdot r \cdot d_r u(r)} = \frac{\Gamma_{\infty}}{\bar{u}(r)/r - d_r \bar{u}(r)}$$

aufstellen. Dadurch läßt sich zum einen überprüfen, ob im Bereich intakter Flußflächen der Transport tatsächlich auf den erwarteten rein stoßbedingten Anteil zurückgeht, und zum anderen, in welcher Weise Inseln oder stochastische Bereiche konkret den Transport erhöhen.

In den Abbildungen 6.8 bis 6.13 sind die Ergebnisse der Simulation dargestellt. Wie erwartet ergibt sich für den Diffusionskoeffizienten der berechnete Wert D_0 im Bereich ungebrochener Flußflächen. Auch der Gesamtfluß Γ_{∞} stimmt für den Fall $\varepsilon = 0$ sehr gut mit dem berechneten überein. Ebenso läßt das Dichteprofil $\bar{u}(r)$ in diesem Fall keine Abweichungen vom in 6.3.1 vorhergesagten erkennen. Die Geometrie des Problems ist also korrekt berücksichtigt worden und die Statistik der numerischen Daten ist gut genug, um für alle berechneten Fälle klare Aussagen über die Transporteigenschaften in dem System zu machen.

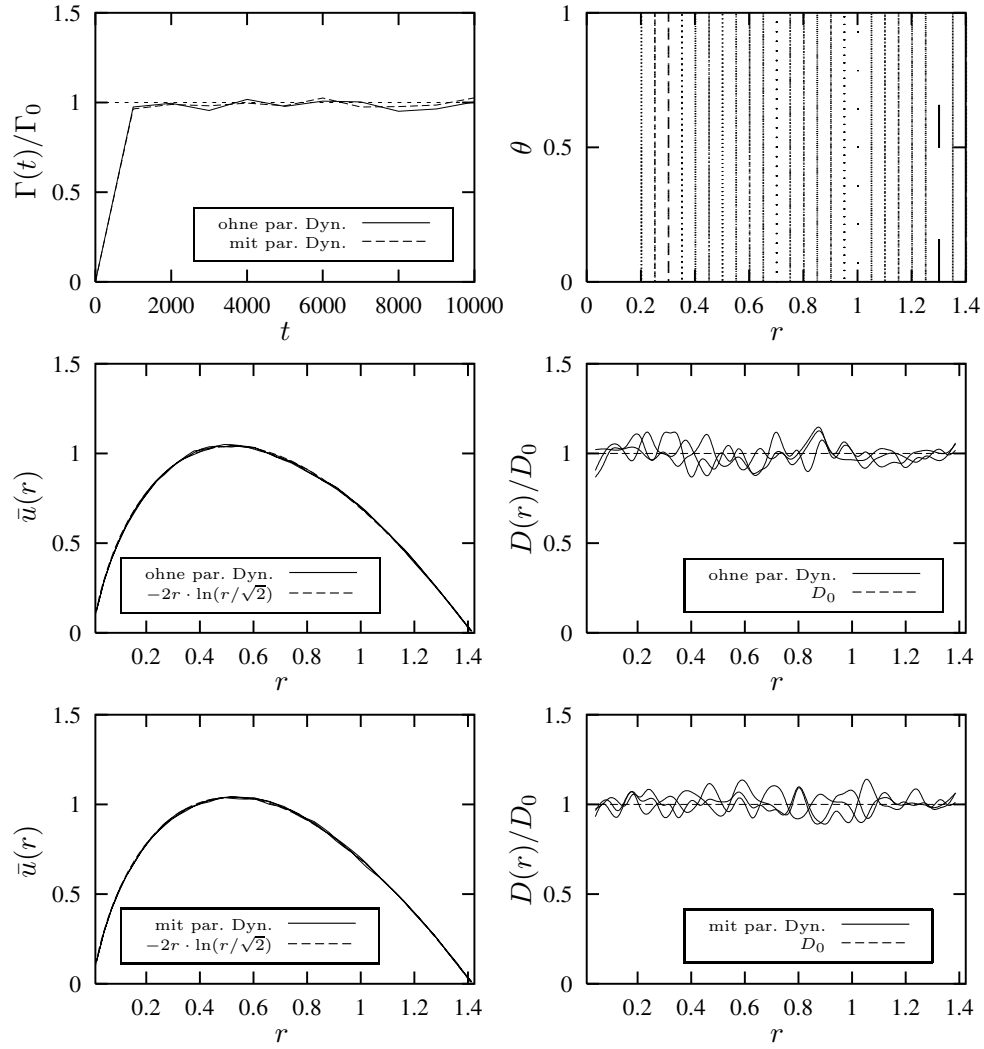


Abbildung 6.8: Ergebnis der Simulation für $\varepsilon = 0.00$ mit und ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

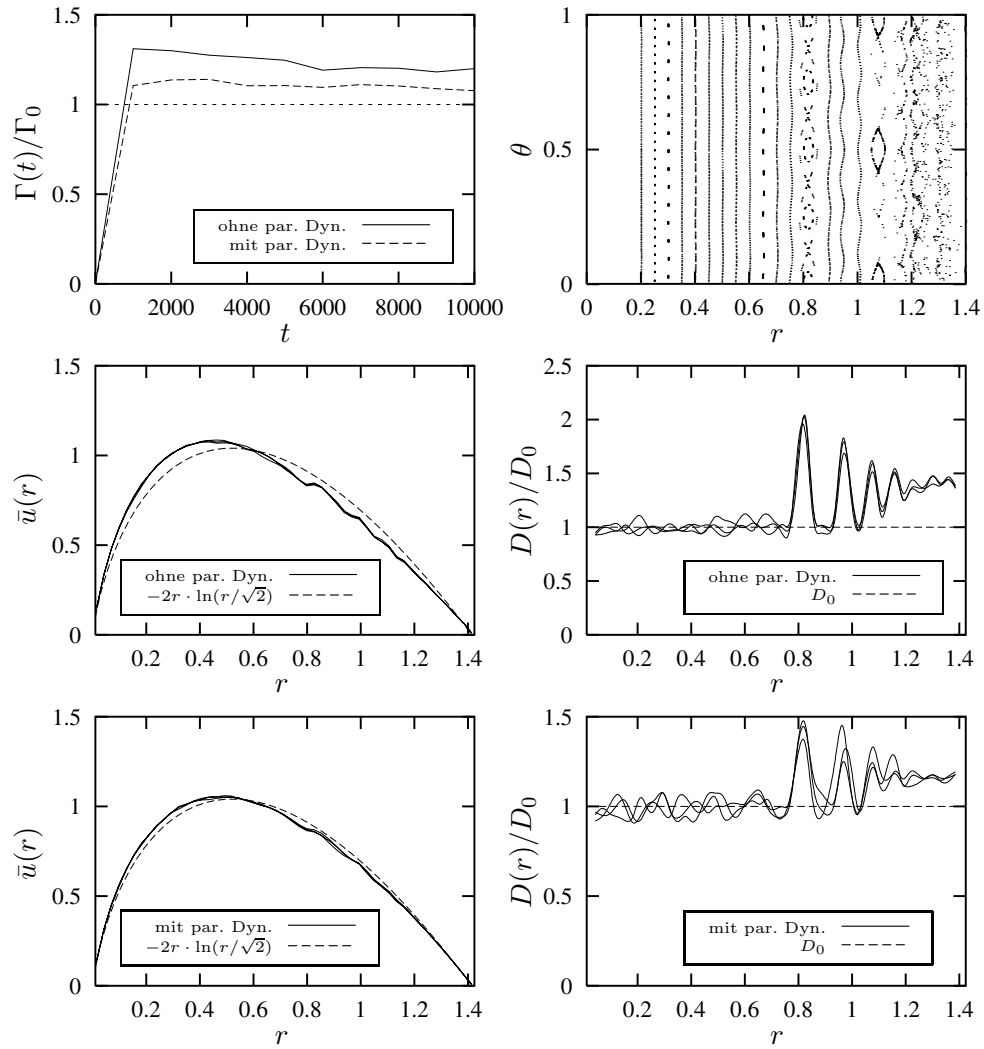


Abbildung 6.9: Ergebnis der Simulation für $\varepsilon = 0.02$ mit und ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

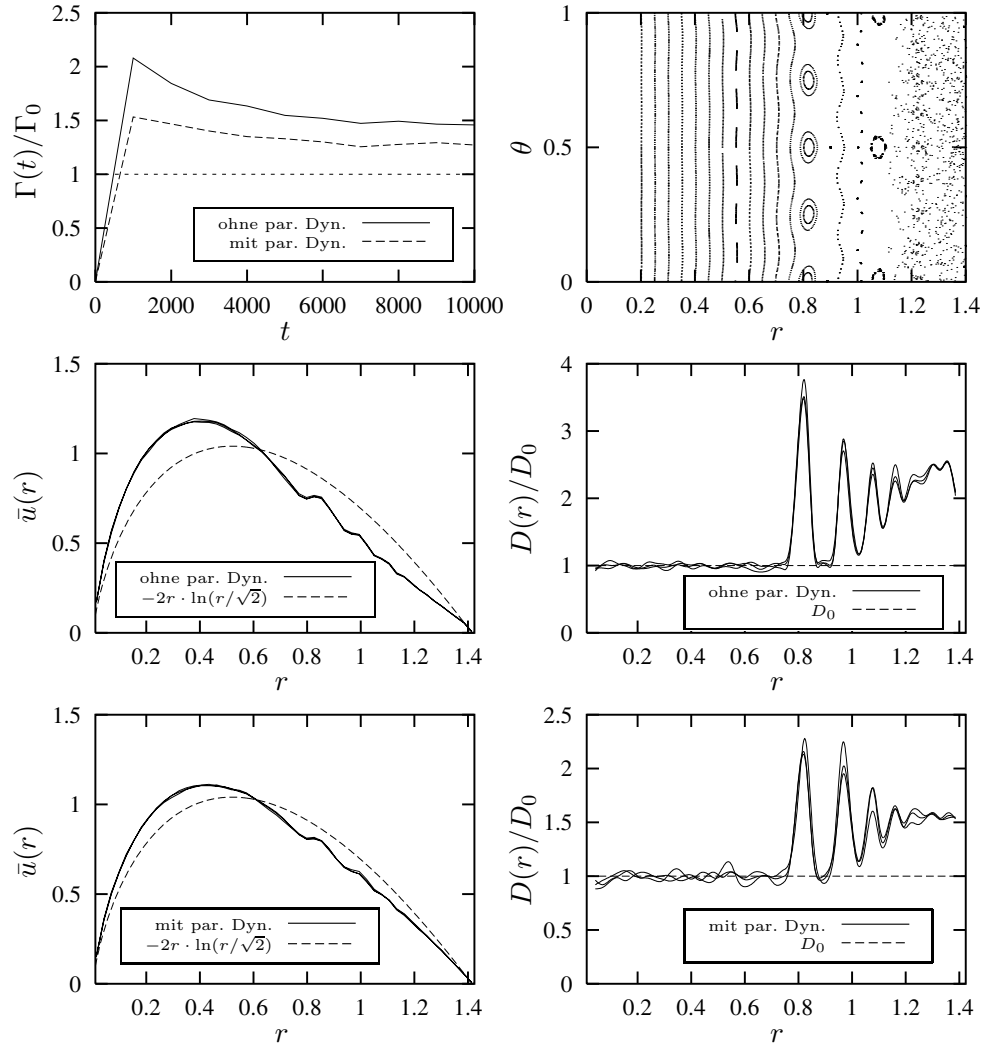


Abbildung 6.10: Ergebnis der Simulation für $\varepsilon = 0.04$ mit und ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

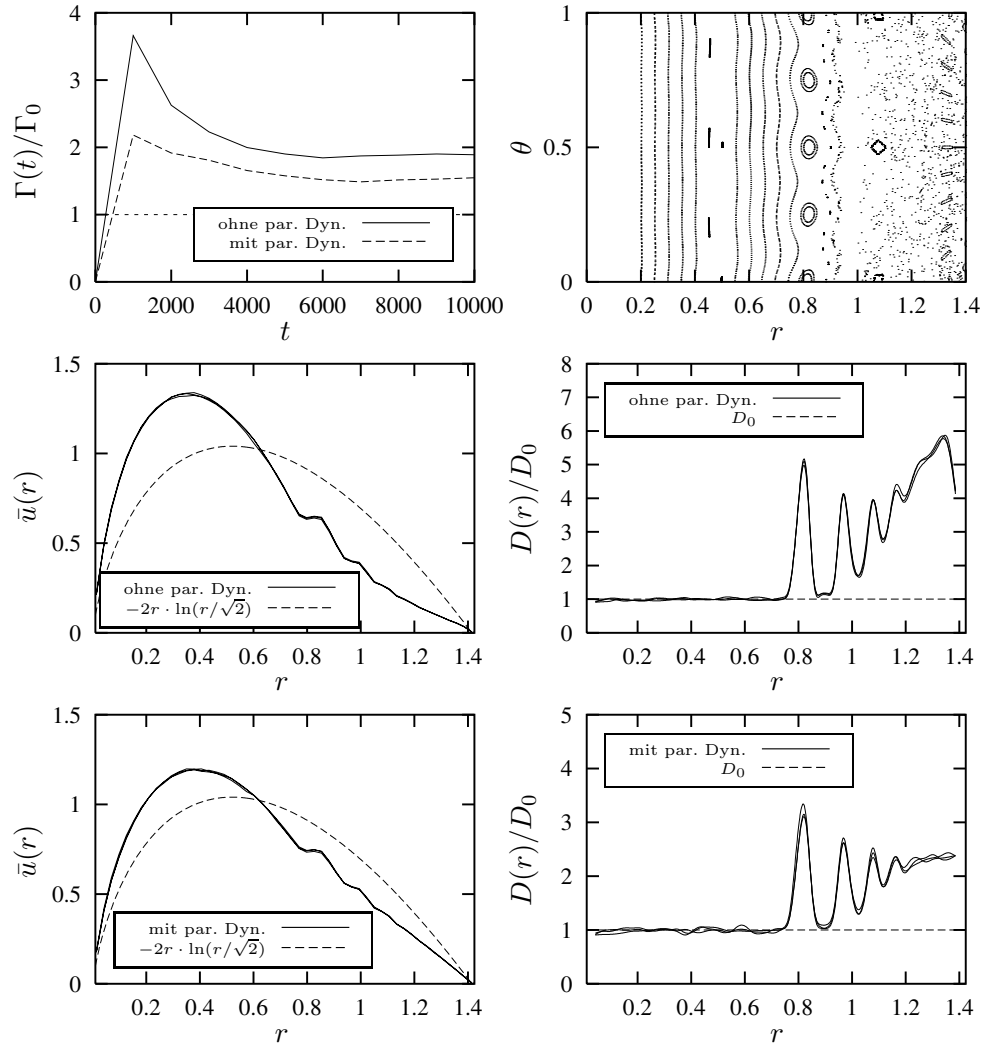


Abbildung 6.11: Ergebnis der Simulation für $\varepsilon = 0.06$ mit und ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

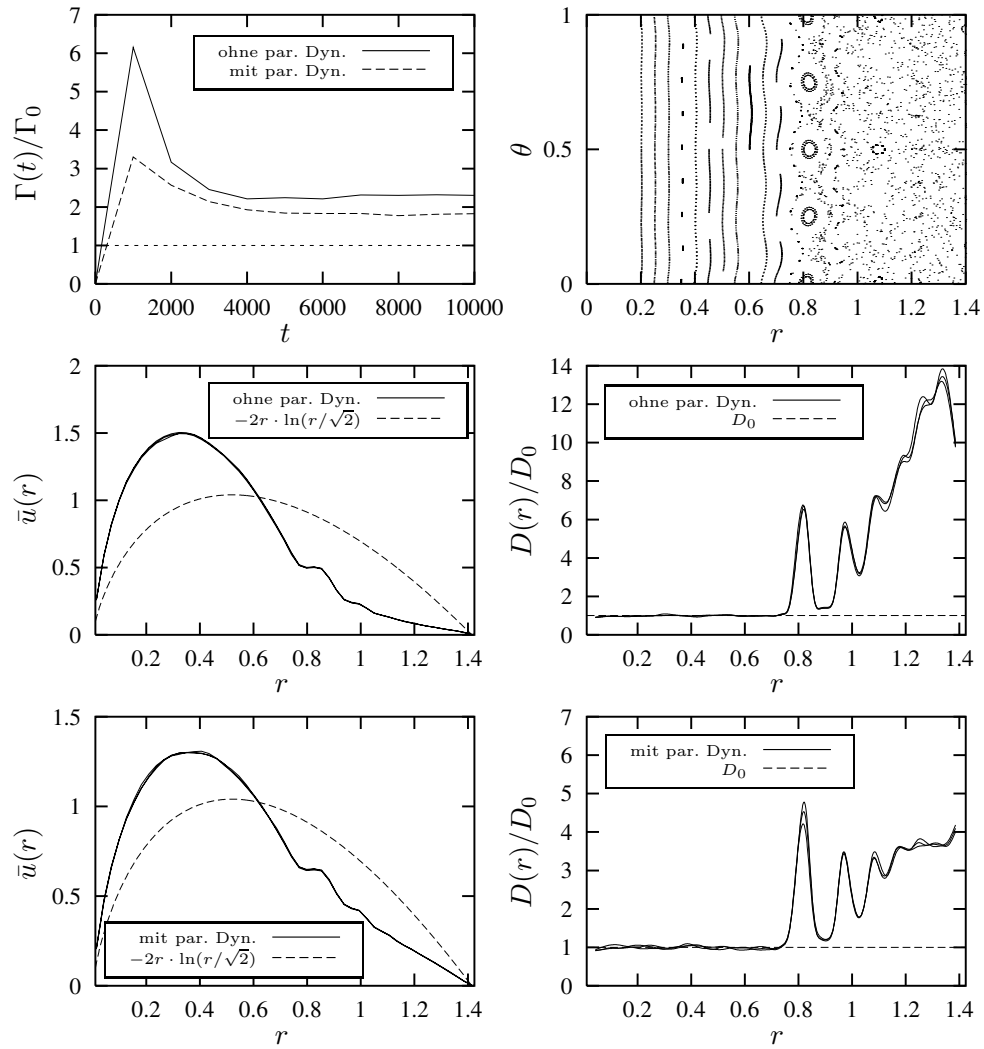


Abbildung 6.12: Ergebnis der Simulation für $\varepsilon = 0.08$ mit und ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

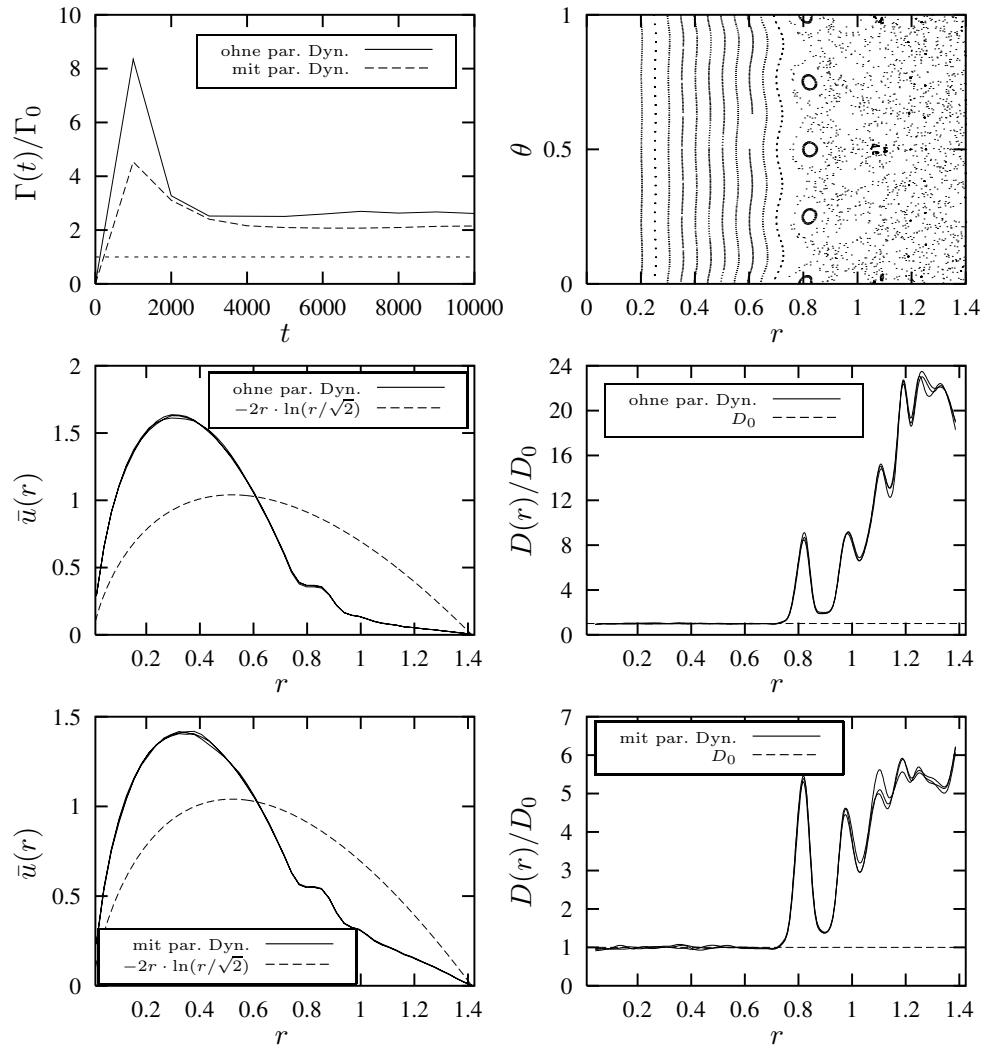


Abbildung 6.13: Ergebnis der Simulation für $\varepsilon = 0.10$ mit und ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

6.3.3 Mittlere freie Weglänge

Ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik sollte der Diffusionskoeffizient im Bereich starken stochastischen Transports durch Feldlinien nicht von der gewählten mittleren freien Weglänge für senkrechte Stöße abhängen. Der Teilchendiffusionskoeffizient ist dabei durch

$$D_p = v_{th} \cdot D_m$$

gegeben. In den Abbildungen 6.14 bis 6.17 sind jeweils für verschiedene Werte von ε die Ergebnisse von Simulationen mit unterschiedlichen mittleren freien Weglänge l_f aufgetragen. Man erkennt deutlich, daß im stochastischen Bereich des Phasenraums keine statistisch signifikanten Abweichungen der Diffusionskoeffizienten für verschiedene mittlere freie Weglängen auftreten. Dies bedeutet, daß der Transport durch die Bewegung der Feldlinien bestimmt ist und nicht mehr durch die Stöße zwischen den Teilchen. Das System befindet sich in einem „stoßfreien“ Zustand.

Ganz anders verhält es sich dagegen, wenn man die Bereiche ausgeprägter Inseln ohne nennenswerten Überlapp betrachtet. Hier ist eine deutliche Abhängigkeit von der mittleren freien Weglänge l_f erkennbar. Nimmt man als einfaches Modell an, daß die Teilchen durch die Inseln sehr schnell transportiert werden, so kann man als Schrittweite eines solchen Zufallsprozesses die Breite der Insel annehmen. Die Streufrequenz ist dabei das Inverse der mittleren freien Weglänge, wenn man bedenkt, daß die mittlere Geschwindigkeit der Teilchen in dimensionslosen Einheiten gerade 1 ist. Somit sollte sich eine Abhängigkeit

$$D_{Insel} = D_I \cdot \frac{\Delta r_m^2}{l_f}$$

ergeben. Auch diese Abhängigkeit ist gut erkennbar, wobei natürlich der Vorfaktor D_I eine unbekannte Größe darstellt. Setzt man die in der Simulation verwendeten Werte in obige Formel ein, so kann man daraus die Größenordnung von D_I aus den Ergebnissen abschätzen. Es ergibt sich ein Wert

$$\frac{D_I}{D_0} = \frac{D_{Insel}}{D_0} \cdot \frac{l_f}{\Delta r_m^2} \approx 3 \cdot 10^{-3} ,$$

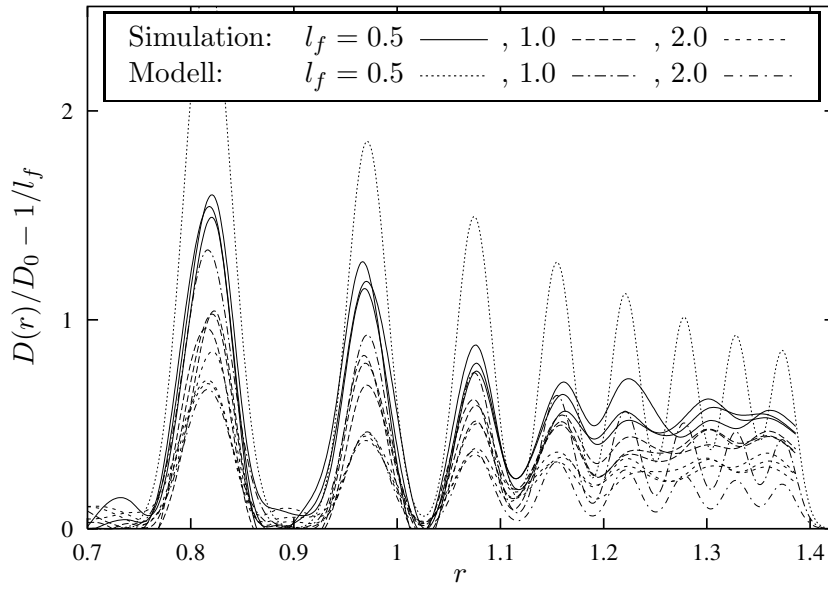


Abbildung 6.14: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.02$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

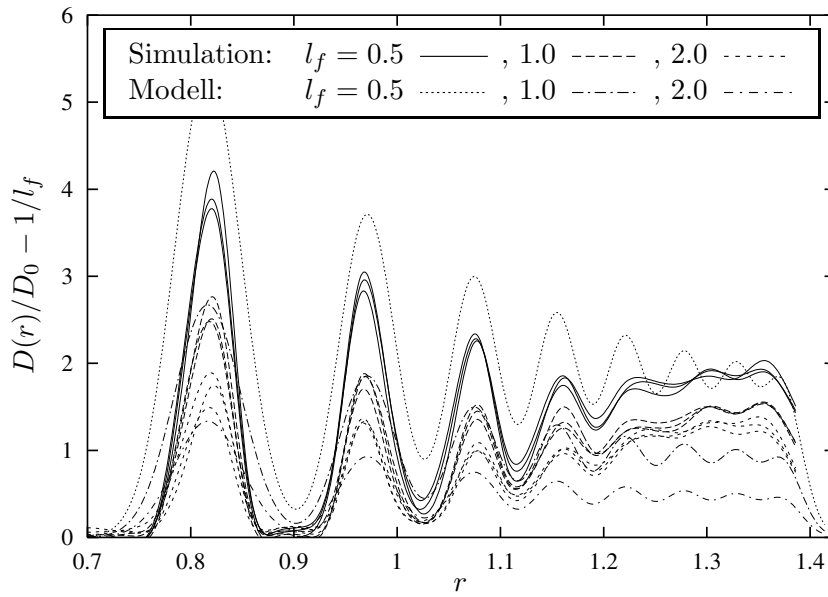


Abbildung 6.15: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.04$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

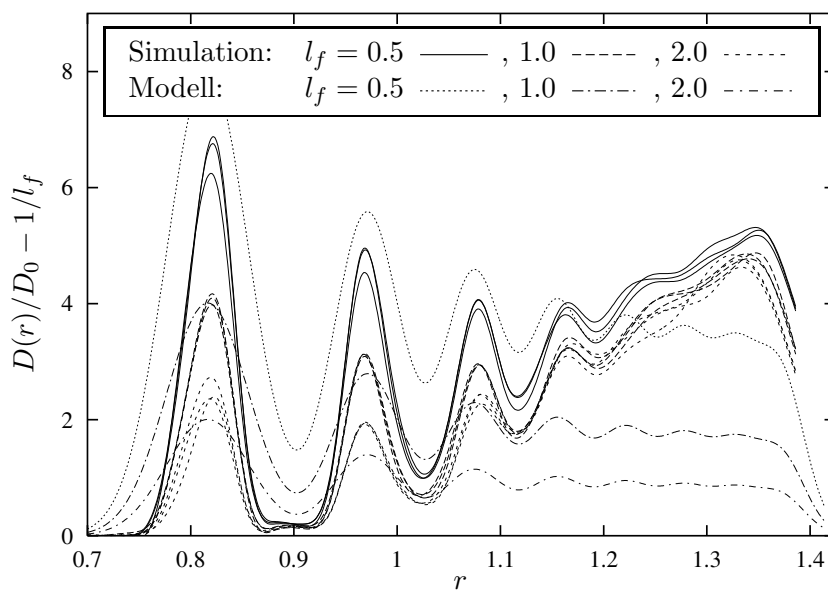


Abbildung 6.16: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.06$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

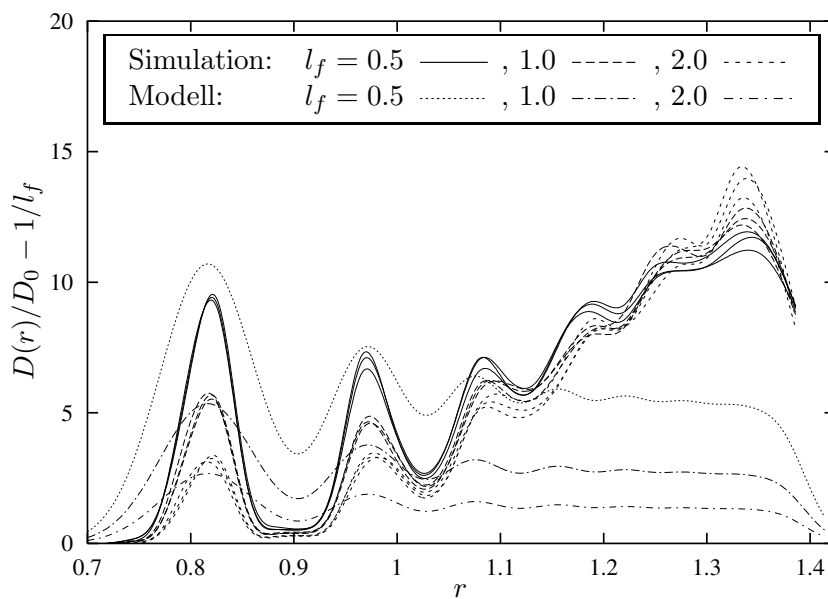


Abbildung 6.17: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.08$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

der relativ klein ist. Ein Teilchen wird also keineswegs zwischen zwei Stößen „über“ eine Insel befördert. Da die Umlaufgeschwindigkeit von Trajektorien in einer Insel gerade zur Separatrix hin gegen 0 konvergiert, ist dieses Ergebnis verständlich. Um einen quantitativen Wert für D_I zu berechnen, müßte man die Eindringtiefe der Teilchen in die Insel berücksichtigen, da von dieser die Umlaufgeschwindigkeit maßgeblich abhängt.

6.3.4 Vergleich quasilineare Theorie

Da man also in den Simulationen ohne parallele Dynamik im stochastischen Bereich ausschließlich Transport durch Feldlinien beobachtet, sollte in diesem Bereich auch die quasilineare Näherung eine gute Beschreibung des Diffusionskoeffizienten liefern. Mit steigendem ε wird die Näherung besser, was unmittelbar einleuchtend ist. Je stärker die einzelnen Resonanzen überlappen, desto besser sollten die Annahmen der quasilinearen Näherung zutreffen.

Betrachtet man zuerst Abbildung 6.18, so erkennt man klar einzelne Inseln. Außerdem hängt der Diffusionskoeffizient deutlich von der mittleren freien Weglänge l_f ab. Dementsprechend schlecht ist die Übereinstimmung mit der quasilinearen Näherung. Dies bedeutet, daß einzelne Resonanzen nicht stark überlappen können, wie dies auch die topologische Abschätzung in Tabelle 6.2 erwarten lassen würde. Selbst für Radien am äußeren Rand des Systems ($r > 1.2$) ist noch eine Abhängigkeit von der mittleren freien Weglänge l_f sichtbar, obwohl keine einzelnen Resonanzen mehr im Diffusionskoeffizienten aufgelöst werden. Der Diffusionskoeffizient erreicht gerade einmal die Hälfte des Wertes der am stärksten den Transport fördernden Insel ($m = 4$).

Diese Situation beginnt sich in Abbildung 6.19 bereits zu ändern. Auch wenn der Wert des Diffusionskoeffizienten im Bereich $r > 1.2$ noch nicht den des Inseltransports der $m = 4$ Resonanz erreicht hat, so ist doch der Abstand deutlich geschrumpft. Die Rechnungen mit verschiedener mittlerer freier Weglänge l_f gleichen sich ebenfalls in diesem Bereich stark an. Das System beginnt eine Transition von einem durch einzelne Inseln getragenen Transportregime in ein neues. Die immer bessere Übereinstimmung zwischen Simulation und quasilinearer Näherung bestätigt, daß dieses Transportregime die Voraussetzungen für die quasilineare Näherung erfüllt. Dies bestätigt auch die Topologie des Systems. Für $\varepsilon = 0.6$ überlappen nach Tabelle 6.2 die $m = 10$ und die $m = 11$ Resonanz.

In dem Umfang, in dem weitere Resonanzen überlappen, verschwindet die Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten von der mittleren freien Weglänge

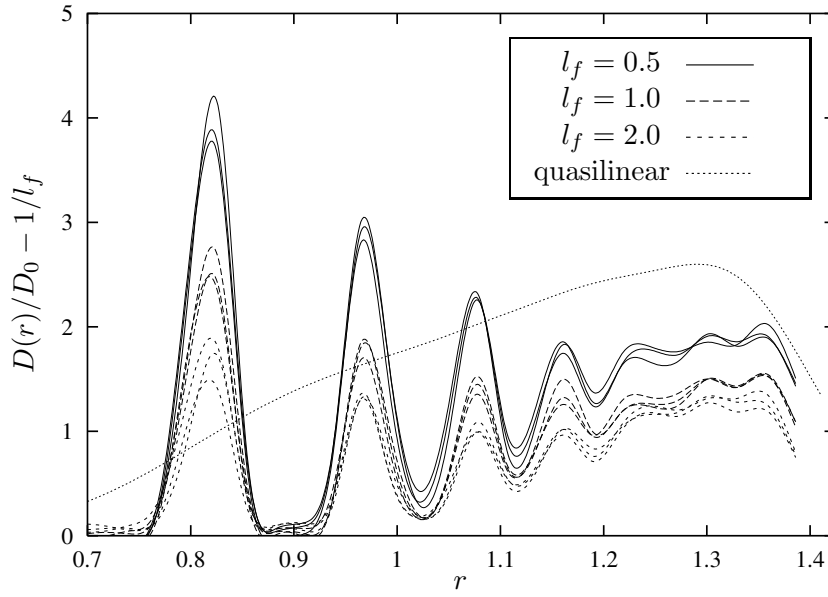


Abbildung 6.18: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.04$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

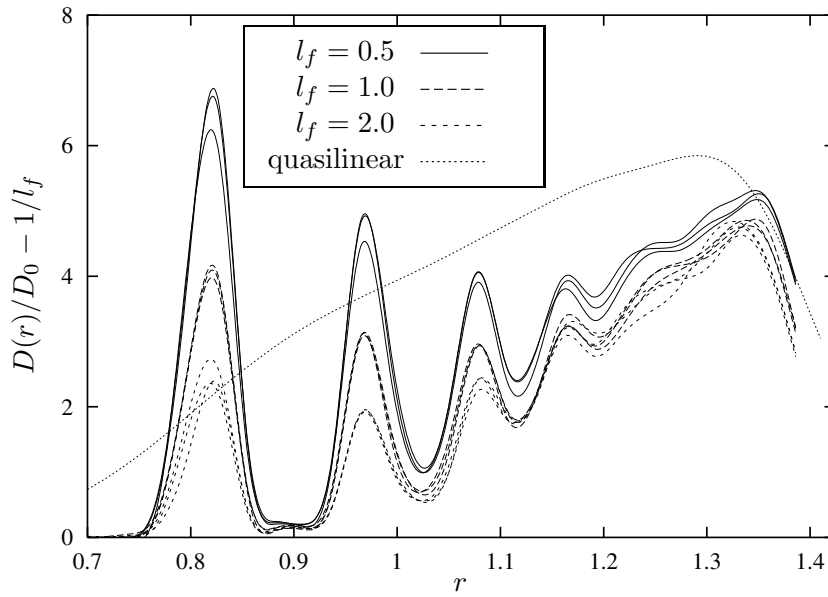


Abbildung 6.19: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.06$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

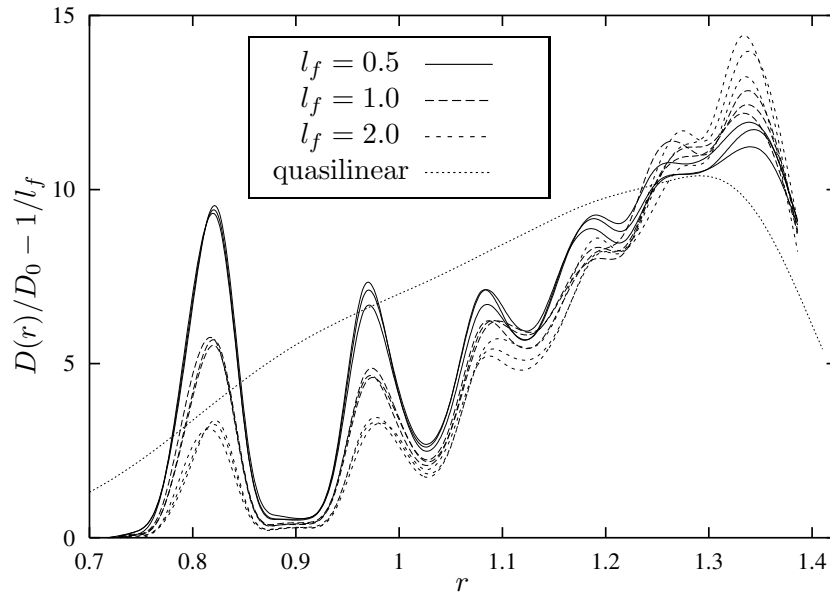


Abbildung 6.20: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.08$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

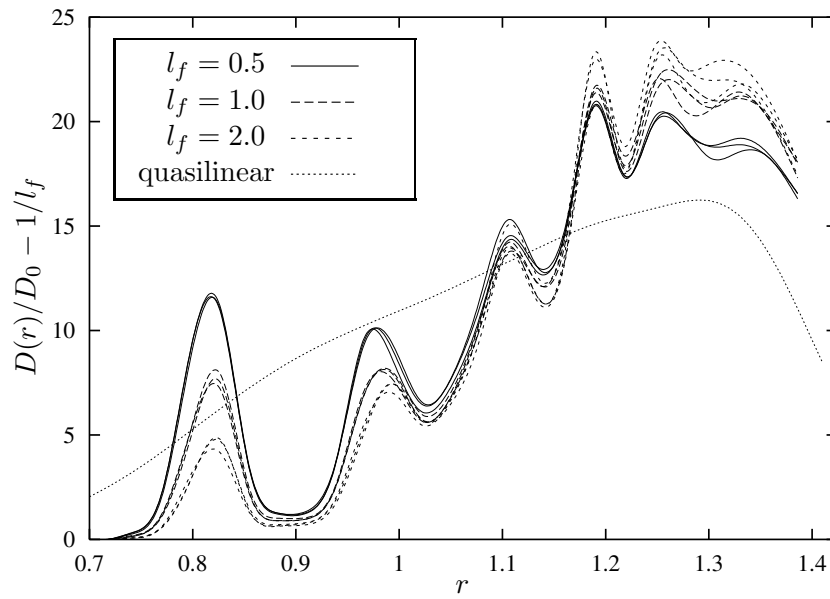


Abbildung 6.21: Vergleich verschiedener mittlerer freier Weglängen l_f für $\varepsilon = 0.10$ ohne Berücksichtigung der parallelen Dynamik des Systems

l_f . In Abbildung 6.20 ist noch eine deutliche Abhängigkeit für die $m = 5$ Resonanz zu erkennen, in Abbildung 6.21 ist diese bereits fast vollständig verschwunden. Vergleicht man diese Entwicklung des quasilinearen Transportregimes mit dem aus der Topologie berechneten Überlapp der Resonanzen in Tabelle 6.2, so erkennt man, daß diese eine sehr gute Übereinstimmung zeigen. Sobald $s > 1$ wird, also Resonanzen überlappen, verschwindet die Abhängigkeit von der mittleren freien Weglänge l_f .

Insgesamt betrachtet ergibt sich damit folgendes Bild: Während die quasilineare Näherung den Diffusionskoeffizienten noch für kleine Werte von ε überschätzt, gleichen sich die Kurven mit steigendem ε immer stärker an. Bemerkenswert ist hierbei, daß die Ortsabhängigkeit des quasilinearen Diffusionskoeffizienten gut mit der Abhängigkeit der numerischen Daten übereinstimmt. Dies erklärt unmittelbar die Tatsache, daß in Abschnitt 6.2.3 verschiedene Diffusionskoeffizienten für verschiedene Anfangsbedingungen bessere Übereinstimmung zeigten.

Für kleine Störungen mit nicht oder nur schwach überlappenden Resonanzen wird der Transport durch Inseln getragen, wogegen für stärkeres Überlappen ein Übergang zu einem quasilinearen Transportregime stattfindet. Gerade der sehr früh einsetzende Teilchentransport durch Inseln, ohne Transport von Feldlinien, stellt dabei ein wichtiges Transportregime dar. Rein vom Standpunkt des Feldlinientransportes würde man nämlich für diese Situation keinen Transport erwarten, da die Feldlinien um die Mitte der Insel umlaufen, ohne stark voneinander abzuweichen. Insbesondere kommt es nicht zu einem „Mischen“ von Feldlinien und einem damit verbundenen positiven Ljapunovexponenten.

6.3.5 Vergleich mit dem Modell von Rechester und Rosenbluth

Da die Berücksichtigung der parallelen Dynamik einen starken Einfluß auf die Transporteigenschaften des Systems ausübt, haben Rechester und Rosenbluth das Verhältnis beider Diffusionskoeffizienten zueinander abgeschätzt.

Setzt man in das Verhältnis

$$\frac{D_{\text{ohne } \parallel\text{-Dynamik}}}{D_{\text{mit } \parallel\text{-Dynamik}}} = \frac{L_K}{l_f} \cdot \ln \left(16.133 \cdot l_f \cdot \frac{L_{\perp}}{L_K} \right)$$

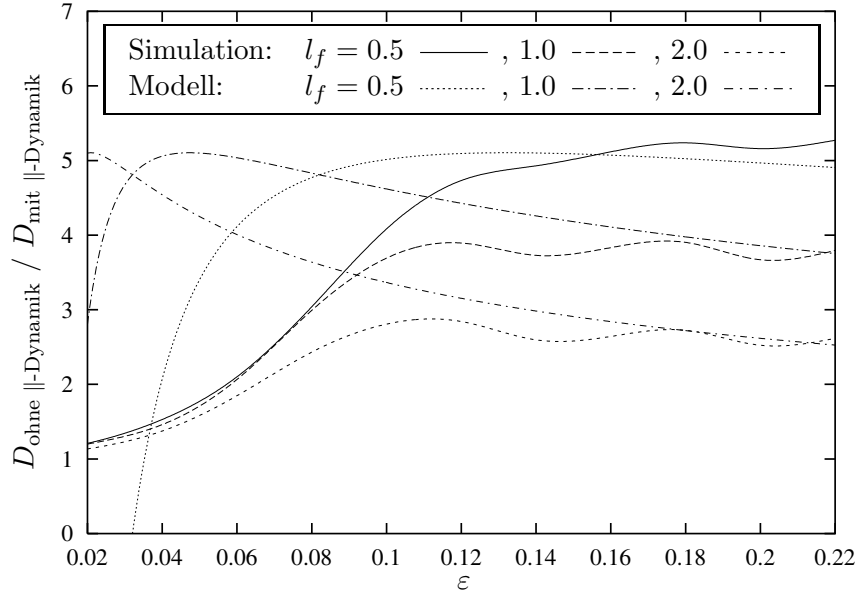


Abbildung 6.22: Verhältnis der Diffusionskoeffizienten mit und ohne parallele Dynamik im Vergleich mit dem Modell von Rechester und Rosenbluth

die gefundene empirische Abhängigkeit des Ljapunovexponenten

$$L_K = \left(\sqrt{1.8 \cdot \varepsilon} - 0.096 \right)^{-1}$$

ein, so erhält man eine von der Stärke der Störung abhängige Größe.

Dabei ist zu beachten, daß die Abschätzung natürlich um so schlechter sein muß, je kleiner die Störung ist, da im Falle einer verschwindenden Störung nur noch Transport durch senkrechte Stöße beiträgt. Dieser ist aber von der parallelen Dynamik unabhängig, so daß das Verhältnis für diesen Fall gerade 1 ergeben muß. In Abbildung 6.22 sieht man gerade diesen Übergang von kleinen Störungen und einem Verhältnis von 1 auf einen Bereich, in dem das Verhältnis aus der Simulation mit dem von Rechester und Rosenbluth abgeschätzten in Einklang ist.

Hierbei spielt die senkrechte Korrelationslänge $L_{\perp}$ eine wichtige Rolle. Da in dem zur Simulation verwendeten System keine starke Abhängigkeit der Störung in radialer Richtung vorhanden ist, ergibt sich diese Korrelationslänge aus den räumlichen Grenzen des Systems. Diese wurde in Abbildung

6.22 als $L_{\perp} = 0.86$ gewählt. Betrachtet man Abbildung 5.6, so sieht man, daß dies in etwa der Ausdehnung des stochastischen Bereichs für $\varepsilon = 0.1$ entspricht.

Für kleinere und größere Werte von ε müßte dieser Wert im Prinzip angepaßt werden. Da sich der stochastische Bereich für größere ε nur wenig weiter ausdehnt, führt dies nur zu kleinen Korrekturen. Für kleinere Werte von ε sieht die Situation jedoch anders aus. Dadurch daß immer weniger Resonanzen überlappen, müßte $L_{\perp}$ zu kleineren Werten korrigiert werden. Deutlich ist dieser kleinere stochastische Bereich in Abbildung 5.4 zu erkennen.

Damit ergibt sich dann auch für das Verhältnis der Diffusionskoeffizienten ein kleinerer Wert als in Abbildung 6.22 aufgetragen. Die Abweichungen des Modells von den Simulationsdaten im Bereich $\varepsilon \leq 0.1$ lassen sich hiermit gut verstehen. Könnte man $L_{\perp}$ aus den Phasenraumplots berechnen und nicht nur grob mit dem Auge abschätzen, so wäre auch die Übereinstimmung zwischen Modell und Simulation in diesem Bereich wesentlich besser. Für sehr kleine Werte von ε bricht die Näherung natürlich weiterhin zusammen, sobald $L_{\perp}$ so klein geworden ist, daß das Verhältnis zahlenmäßig den Wert 1 erreicht hat.

Insgesamt bleibt das Transportverhalten demnach auch unter Berücksichtigung der parallelen Dynamik diffusiv, wobei allerdings der Diffusionskoeffizient um einen Faktor 2.5 bis 5 unterdrückt ist, welcher sich mit dem Modell von Rechester und Rosenbluth allerdings gut verstehen läßt.

Kapitel 7

Zusammenfassung

Zur Herleitung hochwertiger Abbildungen für gegebene Hamiltonsche Systeme ist ein Integrator mit besonderen Eigenschaften nötig. Es reicht nicht, eine Taylorentwicklung der Differentiale der Bewegungsgleichungen nach der Zeit zu verwenden. Diese können zwar für kleine Zeitschritte die Entwicklung des Systems präzise beschreiben, versagen jedoch für große Schrittweiten, wie sie für Abbildungen benötigt werden.

Die Klasse der symplektischen Integratoren besitzt dagegen die geforderten Eigenschaften. Der wesentliche Unterschied besteht darin, daß diese Integratoren das System durch ein ähnliches — aber vollständig integrables — System ersetzen. Im Grenzfall für unendlich kleine Schritte konvergiert dieses System gegen das ursprüngliche. Damit ist auch automatisch eine Prüfung der Qualität einer gewonnenen Abbildung möglich, da der Übergang von Integration zu Abbildung fließend verläuft.

Um solche Integratoren für in der Plasmaphysik relevante Systeme berechnen zu können, muß es möglich sein, eine beliebige Zerlegung der ursprünglichen Hamiltonfunktion in Summen- und Produktterme wählen zu können. Hierzu wurde der bekannte Formalismus zur symplektischen Integration von in Summen zerlegbaren Hamiltonfunktionen auch auf Produkte und Mischungen beider Formen erweitert. Damit steht eine leistungsfähige mathematische und numerische Methode zur Verfügung, die für alle weiteren Untersuchungen Verwendung findet.

Als erste Anwendung zur Überprüfung der Qualität solcher Integratoren wird die von Balescu et al. vorgeschlagene Tokamap mit ihrem korrespondierenden Hamiltonschen System verglichen. Da dieses δ -Funktionen enthält, wer-

den an die Numerik und den Integrator hohe Anforderungen gestellt. Der Vergleich zeigt, daß eine Übereinstimmung nur erreicht werden kann, wenn die δ -Funktionen anders ausgewertet werden als in der Herleitung der Toka-map. Das Ergebnis ist eine symmetrische Auswertung der δ -Funktionen und eine daraus resultierende symmetrische Abbildung, welche nun auch mit dem Hamiltonschen System übereinstimmende Ergebnisse zeigt.

Hierauf aufbauend wird ein konkretes Hamiltonsches Modellsystem für die Bewegung von Feldlinien vorgestellt, welches die wesentlichen topologischen Eigenschaften eines im Experiment vorkommenden Magnetfeldes besitzt. Der Vergleich verschiedener Schrittweiten liefert die Kontrolle für die korrekte Wiedergabe des ursprünglichen Systems durch die konstruierte Abbildung. Zugleich bestätigt sich damit auch die Eignung symplektischer Integratoren zur Herleitung von Abbildungen.

Fügt man diesem Modell noch die Wirkung von Stößen zwischen Teilchen und die Auswirkung der parallelen Teilchendynamik hinzu, lassen sich verschiedene Transportregimes identifizieren und untersuchen. Dabei stellt sich heraus, daß für kleine Störungen mit geringem Überlapp benachbarter Resonanzen der Transport durch die im Phasenraum entstandenen Inseln bedingt ist. Obwohl die Feldlinien in diesem Fall selber keinerlei Transport zeigen, steigt der Teilchentransport stark an. Da Inseln bereits für sehr kleine Störungen auftreten und auch im Versuch beobachtet werden, könnte dieser Transportprozeß für bestehende Fusionsexperimente durchaus wichtig sein.

Mit stärker werdenden Störungen überlappen die Resonanzen immer mehr und das Transportverhalten geht in ein quasilineares Regime über. Der Transport wird damit in gleichem Maße stochastisch wie sich die Überreste der Inselstrukturen im Phasenraum auflösen. Dabei gibt die quasilineare Näherung sehr gut die radiale Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten wieder.

Weiterhin läßt sich auch der Zusammenhang zwischen Teilchentransport mit und ohne die Berücksichtigung der parallelen Dynamik untersuchen. Der Abschätzung von Rechester und Rosenbluth nach bewirkt die parallele Dynamik eine Verringerung des Diffusionskoeffizienten um einen Faktor ≈ 3 für das betrachtete System. Dies wird durch den Vergleich der durchgeführten Simulationen bestätigt. Somit läßt sich feststellen, daß die Abschätzung von Rechester und Rosenbluth für dieses System den richtigen Zusammenhang liefert.

Literaturverzeichnis

- [1] S. S. Abdullaev, *A new integration method of Hamiltonian systems by symplectic maps*, J. Phys. A: Math. Gen. **32** (1999) 2745–2766
- [2] S. S. Abdullaev, K. H. Finken und K. H. Spatschek, *Asymptotical and mapping methods in study of ergodic divertor magnetic field in a toroidal system*, Phys. Plasmas **6** (1999) 153–174
- [3] L. A. Artsimovich, *Tokamak devices*, Nucl. Fusion **12** (1972) 215–252
- [4] R. Balescu, *Anomalous fluxes in the plateau regime for a weakly turbulent, magnetically confined plasma*, Phys. Fluids B **2** (1990) 2100–2112
- [5] R. Balescu, H.-D. Wang und J. H. Misguich, *Langevin equation versus kinetic equation: Subdiffusive behavior of charged particles in a stochastic magnetic field*, Phys. Plasmas **1** (1994) 3826–3842
- [6] R. Balescu, M. Vlad und F. Spineanu, *Tokamap: A Hamiltonian twist map for magnetic field lines in a toroidal geometry*, Phys. Rev. E **58** (1998) 951–964
- [7] G. Benettin, L. Galgani und J.-M. Strelcyn, *Kolmogorov entropy and numerical experiments*, Phys. Rev. A **14** (1976) 2338–2345
- [8] G. Benettin und J.-M. Strelcyn, *Numerical experiments on the free motion of a point mass moving in a plane convex region: Stochastic transition and entropy*, Phys. Rev. A **17** (1978) 773–785
- [9] D. Bénisti und D. F. Escande, *Origin of diffusion in Hamiltonian dynamics*, Phys. Plasmas **4** (1997) 1576–1581
- [10] D. Bénisti und D. F. Escande, *Nonstandard diffusion properties of the standard map*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 4871–4874

- [11] J. S. Berg, R. L. Warnock, R. D. Ruth und E. Forest, *Construction of symplectic maps for nonlinear motion of particles in accelerators*, Phys. Rev. E **49** (1994) 722–739
- [12] R. J. Bickerton, *Magnetic turbulence and the transport of energy and particles in tokamaks*, Plasma Phys. Control. Fusion **39** (1997) 339–365
- [13] A. H. Boozer, *Guiding center drift equations*, Phys. Fluids **23** (1980) 904–908
- [14] J. R. Cary, D. F. Escande und A. D. Verga, *Nonquasilinear diffusion far from the chaotic threshold*, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 3132–3135
- [15] H. Cendra, D. D. Holm, M. J. W. Hoyle und J. E. Marsden, *The Maxwell-Vlasov equation in Euler-Poincaré form*, J. Math. Phys. **39** (1998) 3138–3157
- [16] S. Chandrasekhar, *Stochastic problems in Physics and Astronomy*, Rev. Mod. Phys. **15** (1943) 1–89
- [17] P. J. Channell und C. Scovel, *Symplectic integration of Hamiltonian systems*, Nonlinearity **3** (1990) 231–259
- [18] B. D. G. Chandran und S. C. Cowley, *Thermal conduction in a tangled magnetic field*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 3077–3080
- [19] P. J. Channell, *Hamiltonian suspensions of symplectomorphisms: an alternative approach to design problems*, Physica D **127** (1999) 117–130
- [20] B. V. Chirikov, *A universal instability of many-dimensional oscillator systems*, Phys. Rep. **52** (1979) 263–379
- [21] M. Coronado, J. Vitela E. und A. Z. Akcasu, *Diffusion of charged particles in tokamak-like stochastic magnetic and electric fields*, Phys. Fluids B **4** (1992) 3935–3951
- [22] D. F. Düchs, A. Montvai und C. Sack, *On diffusion of magnetic field lines*, Plasma Phys. Control. Fusion **33** (1991) 919–935
- [23] K. Elsässer, *Magnetic field line flow as a Hamiltonian problem*, Plasma Phys. Control. Fusion **28** (1986) 1743–1752

- [24] K. Elsässer, D. Düchs und C. Sack, *Stochastic stability of a plasma torus*, Phys. Lett. A **120** (1987) 57–63
- [25] N. N. Filonenko, R. Z. Sagdeev und G. M. Zaslavsky, *Destruction of magnetic surfaces by magnetic field irregularities: Part II*, Nucl. Fusion **7** (1967) 253–266
- [26] K. H. Finken, *Dynamic ergodic divertor (DED) for TEXTOR-94*, Bericht, Institut für Plasmaphysik, Forschungszentrum Jülich GmbH, Association EURATOM-KFA, Germany, 1996
- [27] E. Forest und R. D. Ruth, *Fourth-order symplectic integration*, Physica D **43** (1990) 105–117
- [28] A. Grosman, *Review of experimental achievements with stochastic boundaries*, Plasma Phys. Control. Fusion **41** (1999) A185–A194
- [29] N. G. van Kampen, *Stochastic differential equations*, Phys. Rep. **24** (1976) 171–228
- [30] H. Kinoshita, H. Yoshida und H. Nakai, *Symplectic integrators and their application to dynamical astronomy*, Celest. Mech. Dyn. Astron. **50** (1990-1991) 59–71
- [31] J. A. Krommes, C. Oberman und R. G. Kleva, *Plasma transport in stochastic magnetic fields. Part 3. Kinetics of test particle diffusion*, J. Plasma Phys. **30** (1983) 11–56
- [32] R. I. McLachlan und P. Atela, *The accuracy of symplectic integrators*, Nonlinearity **5** (1992) 541–562
- [33] G. Laval, *Particle diffusion in stochastic magnetic fields*, Phys. Fluids B **5** (1993) 711–721
- [34] R. G. Littlejohn, *Hamiltonian formulation of guiding center motion*, Phys. Fluids **24** (1981) 1730–1749
- [35] J. H. Misguich, J. D. Reuss, Y. Elskens und R. Balescu, *Motion in a stochastic layer described by symbolic dynamics*, Chaos **8** (1998) 248–256
- [36] A. Montvai und D. F. Düchs, *Fluid flow like order-disorder-order transition in non-integrable Hamiltonian systems*, Bericht, JET-P(89)75, JET Joint Undertaking, Abingdon, United Kingdom, 1989

- [37] A. I. Morozov und L. S. Solov'ev, *Motion of charged particles in electromagnetic fields*, Rev. Plasma Phys. **2** (1966) 201–297
- [38] T. G. Northrop und J. A. Rome, *Extensions of guiding center motion to higher order*, Phys. Fluids **21** (1978) 384–389
- [39] J. M. Rax und R. B. White, *Effective diffusion and nonlocal heat transport in a stochastic magnetic field*, Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1523–1526
- [40] A. B. Rechester und T. H. Stix, *Magnetic braiding due to weak asymmetry*, Phys. Rev. Lett. **36** (1976) 587–591
- [41] A. B. Rechester und M. N. Rosenbluth, *Electron heat transport in a tokamak with destroyed magnetic surfaces*, Phys. Rev. Lett. **40** (1978) 38–41
- [42] A. B. Rechester und R. B. White, *Calculation of turbulent diffusion for the Chirikov-Taylor model*, Phys. Rev. Lett. **44** (1980) 1586–1589
- [43] A. B. Rechester, M. N. Rosenbluth und R. B. White, *Fourier-space paths applied to the calculation of diffusion for the Chirikov-Taylor model*, Phys. Rev. A **23** (1981) 2664–2672
- [44] L. E. Reichl, *The transition to chaos*, Springer-Verlag, 1992
- [45] M. N. Rosenbluth, R. Z. Sagdeev, J. B. Taylor und G. M. Zaslavsky, *Destruction of magnetic surfaces by magnetic field irregularities*, Nucl. Fusion **6** (1966) 297–300
- [46] M. N. Rosenbluth, R. D. Hazeltine und F. L. Hinton, *Plasma transport in toroidal confinement systems*, Phys. Fluids **15** (1972) 116–140
- [47] M. de Rover, *Chaos in magnetized plasmas*, Doktorarbeit, Technische Universiteit Eindhoven, 1996
- [48] M. de Rover, A. M. R. Schilham, A. Montvai und N. J. Lopes Cardozo, *Test particle transport in perturbed magnetic fields in tokamaks*, Phys. Plasmas **6** (1999) 2443–2451
- [49] J. M. Sanz-Serna und M. P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, Volumen 7 von *Applied mathematics and mathematical computation*, Chapman & Hall, 1994

- [50] B. D. Scott, *A second-order accurate implicit scheme for strongly coupled fluid equations applied to fluid electron turbulence in a magnetised plasma*, J. Comp. Phys. **124** (1996) 71–84
- [51] K. C. Shaing, *Neoclassical quasilinear transport theory of fluctuations in toroidal plasmas*, Phys. Fluids **31** (1988) 2249–2265
- [52] K. H. Spatschek, M. Eberhard und H. Friedel, *On models for magnetic field line diffusion*, Physica Mag. **20** (1998) 85–93
- [53] K. H. Spatschek, *Basic principles of kinetic equations for particles, waves and magnetic field lines*, unpublished, 1999
- [54] M. Vlad, J.-D. Reuss, F. Spineanu und J. H. Misguich, *Transport scaling and trapping*, J. Plasma Phys. **59** (1998) 707–718
- [55] H.-D. Wang, M. Vlad, E. V. Eijnden, F. Spineanu, J. H. Misguich und R. Balescu, *Diffusive processes in a stochastic magnetic field*, Phys. Rev. E **51** (1995) 4844–4859
- [56] B. Weyssow, *A new procedure for building symplectic integrators*, Bericht DRFC/CAD EUR-CEA-FC-1555, Association Euratom-C.E.A., Department de recherches sur la fusion controlee, C.E.N./Cadarsache, France, 1995
- [57] B. Weyssow, *$E \times B$ guiding-centre motion in three electrostatic waves: statistics of separatrix crossings*, J. Plasma Phys. **59** (1998) 761–772
- [58] R. B. White, A. H. Boozer und R. Hay, *Drift Hamiltonian in magnetic coordinates*, Phys. Fluids **25** (1982) 575–576
- [59] R. B. White und Y. Wu, *Collisionless transport in a stochastic magnetic field*, Plasma Phys. Control. Fusion **35** (1993) 595–599
- [60] H. Wobig, *A dissipative model of plasma equilibrium in toroidal systems*, Z. Naturforsch. **41 a** (1986) 1101–1110
- [61] H. Wobig und R. H. Fowler, *The effect of magnetic surface destruction on test particle diffusion in the Wendelstein VII-A stellarator*, Plasma Phys. Control. Fusion **30** (1988) 721–741
- [62] H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*, Phys. Lett. A **150** (1990) 262–268

- [63] G. M. Zaslavsky und B. V. Chirikov, *Stochastic instability of non-linear oscillations*, Sov. Phys. Usp. **14** (1972) 549–568
- [64] G. M. Zaslavsky, M. Edelman und B. A. Niyazov, *Self-similarity, renormalization, and phase space nonuniformity of Hamiltonian chaotic dynamics*, Chaos **7** (1997) 159–181
- [65] F. Zhang, *Operator-splitting integrators for constant-temperature molecular dynamics*, J. Chem. Phys. **106** (1997) 6102–6106

Danksagung

Zum Abschluß dieser Arbeit möchte ich mich noch ganz herzlich bei allen bedanken, die über die Jahre — direkt oder indirekt, hier an der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf oder privat — zum Gelingen beigetragen haben.