## Entwicklung und Anwendung eines Tree-Codes in Simulationsszenarios der Plasma-Wand-Wechselwirkung

Inaugural-Dissertation

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

vorgelegt von

Benjamin Berberich aus Buchen

Düsseldorf, März 2012

Aus dem Institut für Energie und Klimaforschung 4 des Forschungszentrums Jülich

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

> Referent: Prof. Dr. Detlev Reiter Koreferent: Prof Dr. Alexander Pukhov

Tag der mündlichen Prüfung: 28. Oktober 2011

## Abstract

Processes in the plasma edge layer of magnetic fusion devices occur on widely disparate lengthand time-scales. Also recently developed features in this particular region, such as stochastic magnetic fields, underline the necessity for three dimensional, full-kinetic simulation tools. Contemporary programs often deploy ad hoc assumptions and approximations for microscopic phenomena for which self-consistent ab initio models in principle exist, but are still computationally too expensive or complex to implement. Recently, mesh-free methods have matured into a new class of tools for such first-principles computations which thanks to their geometric flexibility are highly promising for tackling complicated TOKAMAK regions. In this work we have develop the massively parallel Tree-Code PEPC-B (*Pretty Efficient Parallel Coulomb* solver) into a new tool for plasma material interaction studies.

After a brief overview of the working principles of Tree-Codes two main topic groups are addressed:

First the leap-frog Boris integration scheme is discussed and its numerical limitations are pointed out. To overcome these limitations the method is enhanced to a guiding-center integrator. As a proof of principal, numerical experiments are conducted reproducing the anticipated drift kinetic aspects of particle orbits. It turns out that this new technique is much less sensitive to large time steps than the original concept was.

One major drawback of mesh-free methods which hinders their direct use for plasma-edge simulations is the difficulty in representing solid structures and associated boundary conditions. Therefore, an alternative concept is proposed using charge carrying *Wall-Particles*, which fits naturally in the mesh-free doctrine.

These developments incorporate the second main topic group of this report. To prove the physical correctness of this new idea, a quasi one dimensional plasma-wall interface scenario is chosen. By studying the system with great detail, good agreement between numerical findings and semi-analytical results from the literature is achieved. After that verification a broad set of physical parameters are reviewed and corresponding scenarios evaluated. Explicitly the work focuses on the ion kinetics at the sheath edge. Numerical findings in that particular region compare well to established benchmarks in the collisionless limit.

Furthermore results with rotated magnetic fields are presented. In the underlying simulations the newly developed guiding-center integrator is applied. Dedicated comparisons of the findings show good agreement with former theoretical and numerical approaches.

A significant strength of the self-consistent mesh-free concept is its natural capability for including close range Coulomb interactions among charged particles. In this way it is possible, to consider intrinsically collisional scenarios such as the effect of ion-ion collisions on the presheath. Additionally a new developed Monte-Carlo background-scatter-scheme is utilized to introduce charge-exchange collisions into the presheath kinetics of the ions. These last two analyses show little change in sheath-relevant quantities. So the presented results support the widely held view that a viscosity or collisional dominated presheath has little effect on the sheath itself.

## Kurzfassung

Physikalische Prozesse in der Plasmarandschicht moderner Fusionsanlagen laufen oftmals auf ausgedehnten Längen- und Zeitskalen ab. Auch wird durch aktuelle Neuerungen in diesem Bereich, wie etwa stochastisierte Magnetfelder, die Notwendigkeit drei dimensionaler, vollkinetischer Modelle immer offensichtlicher. Für diese Zone angepasste Simulations-Codes nutzen bisher oft ad hoc Annahmen oder Näherungen um diese mikroskopischen Abläufe in makroskopische Berechnungen miteinzubeziehen. Um entsprechend getroffene Aussagen weiter zu präzisieren, ist es daher erstrebenswert, diese a priori gewählten Eingabeparameter sukzessive durch Resultate von ab initio Simulationen zu ersetzen. Eine mögliche Programmklasse, die das leisten könnte, ist in der Familie der gitterfreien Methoden zur Berechnung des selbstkonsistenten elektrischen Feldes zu sehen. Vertreter dieser Gruppe sind unter anderem die sogenannten Tree-Codes (Baumalgorithmen). Diese versprechen durch ihre geometrische Flexibilität, intrinsisches Einbeziehen von Coulomb-Stößen und hohes Auflösungsvermögen ein weites Anwendungsgebiet im Bereich der Simulation von Plasmarandschichtphänomenen. Aus diesen Gründen ist es das erklärte Ziel der vorliegenden Arbeit, den massiv parallelen Tree-Code PEPC-B (Pretty Efficient Parallel Coulomb solver) zu einem Simulationswerkzeug für die Fusionsforschung weiterzuentwickeln.

Nachdem ein detaillierter Überblick über die grundlegende Funktionsweise von Tree-Codes gegeben wurde, wird besonderer Wert auf zwei prinzipielle Entwicklungszweige gelegt. Anfänglich wird der *Leap-Frog-Boris-Solver* und seine numerischen Beschränkungen eingehend diskutiert. Um diese Limitierungen aufzuheben wurde die Methode zu einem neuen Führungszentrumsintegrator erweitert. Im Zuge einer detaillierten Verifikation des Algorithmus wird erfolgreich untersucht, wie das entwickelte Verfahren mit hoher Zeitstabilität Führungszentren geladener Teilchen wiedergibt.

Der andere Hauptschwerpunkt des vorliegenden Berichts stellt die Entwicklung eines neuen Wandmodells für Tree-Codes dar. Da für diese inhärente Schwäche gitterfreier Methoden bisher noch keine eindeutige Lösung existiert, ist eine entsprechende Erarbeitung für den geplanten Einsatz von PEPC-B in der Simulation des Plasma-Wand Kontaktbereich unerlässlich. Eine erfolgreiche Verifikation des neuen "*Wandteilchen-Konzepts*" gelingt dann anhand eines quasi eindimensionales Schichtproblems. Nach dieser prinzipiellen Überprüfung die sowohl anhand von Flüssigkeitsnäherungen als auch kinetischer Vergleichswerte geschieht wird eine weite Bandbreite von physikalischen Simulationsszenarios untersucht. Explizit werden dabei Ionengeschwindigkeitsstatistiken an der Schichtkante mittels PEPC-B erzeugt. Die somit erzielten Resultate stimmen dabei gut mit vergleichbaren, semianalytischen Arbeiten überein.

Das Konzept wird nun auf Simulationen mit zur Oberflächennormalen gedrehten magnetischen Feldern erweitert. Hierbei kommt erstmals der zuvor entwickelte Führungszentrumsintegrator zum Einsatz. Die Resultate über die magnetische Vorschicht werden mit früheren theoretischen sowie numerischen Arbeiten abgeglichen wobei sich gute Übereinstimmung nachweisen lässt. Daraufhin wird eine Störke des Tree Codes ausgenutzt und intrinsisch Coulomb stößige Sys

Daraufhin wird eine Stärke des Tree-Codes ausgenutzt und intrinsisch Coulomb-stößige Systeme untersucht. Außerdem wird mittels eines neuen Monte-Carlo Moduls Neutralgashintergrundreibung in die Untersuchungen miteinbezogen und ausgewertet. Beide letzteren Szenarios belegen nun erstmals durch direkte kinetische Simulationen, dass sich an der eigentlichen Schichtphysik (z.B. Potentialabfall in der Schicht) durch Viskosität beziehungsweise Reibung keine signifikanten Änderungen einstellen.

# Inhaltsverzeichnis

Ab	bildu	ngsverzeichnis	vi
Tał	oeller	verzeichnis	X
1	Einl	eitung	1
2	Gru	ndlegende Methodik	7
	2.1	Das N Körperproblem - Eine königliche Frage	7
	2.2	Baumalgorithmen	9
		2.2.1 Aufbauen des Baumes	9
		2.2.2 Auswerten des Baumes	11
		2.2.3 Rechenaufwand	12
		2.2.4 Numerischer Fehler	13
		2.2.5 Multipolentwicklung in PEPC-B	16
		2.2.6 Parallele Tree-Codes	21
		2.2.7 Bewertung und Einordnung von Tree-Codes	25
		2.2.8 Schematischer Ablauf von PEPC-B vor der Arbeit	26
		2.2.9 Schematischer Ablauf von PEPC-B nach der Arbeit	26
3	Das	Leap-Frog-Schema	31
	3.1	Das Boris-Lösungsschema	33
		3.1.1 Theorie des Schemas	34
		3.1.2 Praktische Realisierung	37
	3.2	Algorithmischer Ablauf der Leap-Frog-Boris-Prozedur	39
	3.3	Numerische Stabilität	39
		3.3.1 Plasmaoszillation	41
		3.3.2 Gyrationsfrequenz	42
	3.4	Die Führungszentrums-Bewegung	44
		3.4.1 Erweiterung zum Führungszentrums-Integrator	49
		3.4.2 Algorithmischer Ablauf des Führungszentrums-Integrators	50
		3.4.3 Tests des Führungszentrums-Integrators	51
	3.5	Super-Teilchen	56
4			
-	Schi	chtsimulationen mittels Tree-Codes	- 57
•	Schi	chtsimulationen mittels Tree-Codes 4.0.1 Leitende Wand	57 58

		4.1.1	Grundlegende Theorie und Bohm-Kriterium	. 60
		4.1.2	Vorschichtbedingungen	. 04
	42	Simula	tionsaufbau	. 69
	т.2 4 3	Simula	tionsszenarios	. 07
	т.5 Д Д	Fvoluti	ion und Konvergenz des Systems	. 72
	$\frac{1.1}{45}$	Wandn	otential	. 75
	т.J Л б	Teilche	andichten	. 01 82
	4.0	4 6 1	Bestimmung der Schichtkante	. 02
	47	Potenti	alabfall in der Schicht	. 05
	- <b>T.</b> /	1 otenti		. 05
5	Anw	endung	und Auswertung des Wandmodells	91
	5.1	Elektro	onenkinetik	. 91
		5.1.1	Fehlen hochenergetischer Elektronen	. 93
	5.2	Ionenk	inetik	. 96
		5.2.1	Geschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante	. 97
		5.2.2	Stößigkeit des Systems	. 110
		5.2.3	Erhöhen der Stößigkeit	. 111
		5.2.4	Neutralgasreibung	. 115
	5.3	Das Bo	hm-Chodura-Kriterium	. 120
		5.3.1	Die magnetische Vorschicht	. 124
	5.4	Verglei	che mit vorherigen Arbeiten	. 128
		5.4.1	Stoßfreie Systeme	. 129
		5.4.2	Stößige Systeme	. 130
6	Vort	pereitun	gen auf Divertorsimulationen	131
Ū	6.1	e-Studi	e	131
	6.2	Einflus	s der Teilchenauflösung	132
	6.3	Parame	eter für ITER-Studie	136
	0.0	6.3.1	Diskussion	. 138
7	7.000	mmonf	accurg und Auchlick	120
/	Lusa	inniem	assung unu Ausbrick	139
A	Beis	piel zur	Schlüsselberechnung	143
B	Erga	inzunge	n zur numerischen Integration	145
_	B.1	Grundl	egende Aussagen und Begriffe	. 145
	B.2	Berech	nung von $\vec{t}$	. 148
С	Leite	ende Wa	and in 1d PIC-Codes	151
D	Ione	ngeschv	vindigkeitsverteilung nach Emmert	153
Lit	teratu	ır und Ç	Quellen	157
Er	kläru	ng		163
Da	Danksagungen			165

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Prinzipieller Aufbau eines Tokamaks	2
2.1 2.2	Bsp. vier Körper die miteinander selbstkonsistent wechselwirken Bsp. Aufteilung eines 2d Simulationsgebietes (links). Daraus resultierender Quartbaum (rechts). Die Gebiete links werden farblich kodiert, mathematisch positiv	7
	den Baumknoten rechts zugeordnet	10
2.3	Schematische Feldberechnung: Weit entfernte Ensemble (blauer Kreis) werden	
0.4	als Multipol-, nahe als Monopol berücksichtigt	11
2.4	Schrager Limiter aus TEX IOR mit Offnung zum Einblasen chemischer Elemente Kohlanstoff anan $C^{+}$ (blau) und Elektronon (zot) für die Simulation einer Cos	14
2.3	injektion	14
26	Draufsicht auf Abbildung (2.5) Die schwarze Eläche ist die Limiteroberfläche	14
2.7	Relativer Fehler $\delta_{\phi}$ gegenüber $\Theta$	15
2.8	Relativer Fehler $\delta_{\phi}$ gegenüber $\epsilon/\bar{i}$ ( $\theta \sim 0, 6$ )	16
2.9	Ladungsverteilung im Volumen V und Integrationsvariable $\vec{x}'$	17
2.10	Zwei Unterboxen mit Ladungsschwerpunkten $\vec{R}^{(1)}$ und $\vec{R}^{(2)}$ die zu einer ge-	
	meinsamen Box mit Schwerpunkt $\vec{R}^{(n)}$ vereinigt werden $\ldots \ldots \ldots \ldots$	19
2.11	Teilchen im $\mathbb{R}^3$ geordnet einer Kurve $\varphi$ folgend $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	22
2.12	Bsp. einer 2d Z-Kurve gleichverteilt auf vier Prozessoren (farbkodiert)	23
2.13	3d Simulation mit Teilchendaten verteilt auf vier Prozessoren (farbkodiert)	23
2.14	Aufteilung des Baumes aus Bsp. (2.2) auf 2 Prozessoren (farbkodiert)	24
2.15	Flussdiagramm für den Ablauf von PEPC-B ohne die in dieser Arbeit einge-	27
2 16	Elussdiagramm für den Ablauf von PEPC-B mit den in dieser Arbeit einge-	21
2.10	bauten Neuerungen (rot hinterlegt). Die Nummerierung entspricht der obigen	
	Auflistung	30
2.1		
3.1	Schematischer Ablauf des Leap-Frog-Integrationsschemas. Der grüne Pfeil zeigt	22
27	den speziellen, halben Zeitschritt zu Anlang um $v_{1/2}$ zu erhalten an	32
5.2	B-reid in benediger Kichtung und vertoren $v_{\pm}$ copranar in der Ebene C. $v_{\pm}$ in der Ebene S. sonkracht zu $\vec{R}$	25
33	Veranschaulichung der Drehung von $\vec{v}_{i}$ auf $\vec{v}_{i}$ in der Ebene S senkrecht zu $\vec{B}$	55
5.5	(vg], [1]).	35
3.4	Ausschnitt einer gleichförmige Bewegung eines Teilchens in einem homogenen	
	Magnetfeld	36

3.5	In der Ebene S senkrecht zu $\vec{B}$ für die Drehung eingeführte Hilfsvektoren $\vec{v}', \vec{t}$	38
3.6	Vergleich von $\tau_p$ (3.35) und $\tau_c$ (3.36) aufgetragen über der Plasmadichte $n$ bei	50
	$B = 2 \mathrm{T} \dots \dots$	40
3.7	Gyrationsradius bei ansteigender Zeitschrittweite	44
3.8	Teilchengyration für kleine ( $\omega_c \Delta t = 0, 1$ ) und große Zeitschritte ( $\omega_c \Delta t = 10$ )	44
3.9	Projektion von Abb. $(3.8)$ in die $yz$ -Ebene	45
3.10 3.11	Bezeichnungsweise für die Beschreibung der Führungszentrumsbewegung Projektion des Führungszentrums für den $\nabla B$ -Drift in die $xy$ -Ebene ( $\omega_c \Delta t =$	46
	0,1)	54
3.12	Projektion des Führungszentrums für den $\nabla B$ -Drift in die $xy$ -Ebene ( $\omega_c \Delta t = 1000$ )	54
3.13	Projektion des Führungszentrums für den $\nabla B$ -Drift in die $xz$ -Ebene ( $\omega_c \Delta t = 0, 1$ )	54
3.14	Relative Abweichung $\delta_z$ (3.88) in z-Richtung für den $\nabla B$ -Drift ( $\omega_c \Delta t = 1000$ ) Preichtion des Führungsgentrums für den $\nabla B$ Drift in die zur Ehene (höhere	54
5.15	Auflösung von Abb. $(3.12)$ )	55
3.16	Projektion des Führungszentrums für den $\nabla B$ -Drift in die $xy$ -Ebene (höhere Auflösung von Abb. (3.15))	55
3.17	Ändern der Zeitschrittweite während einer Simulation	56
4.1	Skizze der Schicht und Vorschicht sowie schematischer Potentialverlauf	60
4.2	Skizze des Potentialverlaufs und Bezeichnungen in der Schicht	61
4.3	Schematischer Aufbau der Simulation	70
4.4	Teilchenfluss auf die Wand (Szenario I)	76
4.5 4.6	Gesamtladung auf der Wand (Szenario I)	76
47	geladene Teilchen sind Sonden- bzw. Wandteilchen (Szenario I, x-Achse in $1/\lambda_D$ ) Simulationsbox nach 1000-Zeitschritten (Szenario I)	77 77
4.8	Simulationsbox nach 1000 Zeitschritten (0Zeitario I)	77
4.0	Simulationshow nach 1000 Zeitschritten mit selbstkonsistentem Detential en den	//
4.9	Teilchenpositionen (Szenario I)	77
4.10	Ionenphasenraum nach 3000 Zeitschritten ( $1/4 \tau_b$ )	79
4.11	Ionenphasenraum nach 9000 Zeitschritten ( $3/4 \tau_b$ )	79
4.12	Ionenphasenraum nach 18000 Zeitschritten ( $^{3}/_{2} \tau_{b}$ )	79
4.13	Ionenphasenraum nach 6000 Zeitschritten ( $1/2 \tau_b$ )	79
4.14	Ionenphasenraum nach 12000 Zeitschritten (1 $\tau_b$ )	79
4.15	Ionenphasenraum nach 24000 Zeitschritten (2 $\tau_b$ )	79
4.16	Evolution der Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I) im Bereich $[0, 9 - 0, 95]l_x$	80
4.17	Evolution des Potentials (Szenario I) über dem Abstand x von der Wand bei $x = 80 \lambda_D$	80
4.18	Evolution des Potentialabfalls in der Schicht (Szenario I) aufgetragen über der Zeit	81
4.19	Renormalisiertes Potential $\Phi$ auf der Wand (Szenario I)	82

4.20	Teilchendichten integriert über $y \in [0, l_y]$ und $z \in [0, l_z]$ (Szenario I)	83
4.21	Teilchendichte integriert über $x \in [24, 56]\lambda_D$ und $z \in [0, l_z]$ (Szenario I)	83
4.22	Ort der Schichtkante $x_s e$ Szenario I bei unterschiedlicher Teilchenauflösung	84
4.23	Potentialverlauf (Szenario I)	85
4.24	Potentialverläufe (Szenario II a/b/c)	86
4.25	Potentialabfall in der Schicht bei unterschiedlichen Massenverhältnissen	89
4.26	Potentialabfall in der Schicht bei unterschiedlichen Massenverhältnissen (loga- rithmische Auftragung)	89
4.27	Potentialabfall in der Schicht bei unterschiedlichen Temperaturverhältnissen	89
4.28	Potentialabfall in der Schicht bei unterschiedlichen Temperaturverhältnissen	
	(logarithmische Auftragung)	89
4.29	Potentialabfall in der Schicht bei verschiedenen $l_x$ (Szenario I und Szenarios I	
	a/b/c)	90
5.1	Elektronengeschwindigkeitsverteilung in $z$ -Richtung (Szenario I) im Bereich 2	
011	$[0.5 - 0.55]l_x \dots \dots$	92
5.2	Phasenraum der Elektronen (Szenario I)	93
5.3	Elektronengeschwindigkeitsverteilungen in den Bereichen 1-3 (siehe Abb. (5.2))	93
5.4	Elektronengeschwindigkeitsverteilungen aus Abb. (5.2). logarithmische Auftra-	
	gung	94
5.5	Elektronengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I) ohne	
	hochenergetische, rückläufige Elektronen	95
5.6	Ionengeschwindigkeitsverteilung in z-Richtung (Szenario I) im Bereich $[0, 5 -$	
	$0,55]l_x$	96
5.7	Phasenraum der Ionen (Szenario I)	97
5.8	Ionengeschwindigkeitsverteilungen in den Bereichen 1-3 (siehe Abb. (5.7))	97
5.9	Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I) mit numeri-	
	schem Fit der Art (5.16) sowie Kurve nach Emmert et. al [2]	98
5.10	Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I). Beiträge der	
	einzelnen Funktionsteile	101
5.11	Ionengeschwindigkeitsverteilungen im Bereich 3 (Szenario II a/b/c)	103
5.12	Histogramme über $v_x^i/c_s$ . Zusätzlich zeigt das dunkelgrüne Histogramm eine	
	Verteilung analog Szenario II b mit $T_e/T_i = 2$	105
5.13	Fitfunktion mit neuer Schallgeschwindigkeit normiert aus Szenario II a angelegt	
	an die Werte aus Szenario II b	106
5.14	Auf 1 normierte Geschwindigkeitsverteilungen verschiedener Teilchenquellen	
	mit den physikalischen Parametern aus Szenario I. Zur näheren Erklärung siehe	
	nebenstehende Erläuterung	107
5.15	Simulationsergebnis mit Emmert-Quelle sowie analytische Lösung vor der Wand	
	und in der Quellregion (Szenario IV b; $T_e/T_i = 1$ )	108
5.16	Simulationsergebnis mit Emmert-Quelle sowie analytische Lösung vor der Wand	
	und in der Quellregion (Szenario IV a; $T_e/T_i = 0, 5$ )	108
5.17	Kinetische Energie der Ionen im Vergleich mit dem Potentialverlauf (4.23)	
	(Szenario I)	111
5.18	Potentialverläufe vor der Wand. Szenario I (stoßfrei) und Szenario III (stößig) .	112

5.19	Kinetische Energie der Ionen im Vergleich mit dem Potentialverlauf (4.23)	
	(Szenario III)	113
5.20	Phasenraum der Ionen (Szenario III)	114
5.21	Ionengeschwindigkeitsverteilungen in den Bereichen 1, 2 und 4	114
5.22	Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario III) mit nume-	
	rischen Fit der Art (5.16) sowie Kurve nach Emmert et. al [2]	114
5.23	Potentialverläufe bei verschiedenen Neutralgasdichten $n_h$ (Szenario II b: $T_h =$	
	20 eV) mit ansteigendem Potentialabfall in der Vorschicht $\mathcal{E}$	118
5.24	Ionenphasenraum bei $n_b = 10^{21} \text{ m}^{-3}$ (Szenario II b: $T_b = 20 \text{ eV}$ )	119
5.25	Ionengeschwindigkeitsverteilung im Bereich 2 bei $n_b = 10^{21} \text{ m}^{-3}$ (Szenario II	
	$h: T_h = 20 \text{ eV}$	120
5.26	Ionengeschwindigkeitsverteilung im Bereich 3 (Schichtkante) bei $n_{\rm b} = 10^{21}  {\rm m}^{-3}$	
0.20	(Szenario II b: $T_{\rm b} = 20 \text{ eV}$ )	120
5 27	Skizze der Schicht und Vorschicht sowie schematischer Potentialverlauf im Fal-	120
5.21	le eines um den Winkel $\alpha$ gedrehten B-Feldes	121
5 28	Festlegung der Geometrie und Bezeichnungsweisen	122
5 29	Potentialverläufe bei um verschiedene $\alpha$ gegen die Oberflächennormale gedreh-	122
5.27	tem B-Feld (Szenario I)	125
5 30	Magnetische Vorschicht und Schicht bei um verschiedene $\alpha$ gegen die Ober-	123
5.50	flächennormale gedrehten B-Feld (Szenario I)	126
5 31	Mittlere Geschwindigkeitskomponenten der Ionen bei $\alpha - 45^{\circ}$	120
5 32	Skizze der Geschwindikeitskomponenten an zwei Stellen $x_{-}$ und $x_{i}$ in der $x_{i-}$	1 / /
5.52	Experience of the second matrix of the second seco	127
5 22	Even $(x_2 \equiv x_a < x_b \equiv x_3) \dots \dots$	127
5.55	$E \times D$ -Difft in z-Kichtung für $\alpha = 45$	120
6.1	Elektronengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante für $\epsilon = 10^{-5}$ m und	
	numerischer Fit (Szenario I)	132
6.2	Potentialverläufe für verschiedene Werte von $\epsilon$ normiert mit $T_e^{(se)}$ aus Tabelle	
	(6.1) (Szenario I)	133
6.3	Potentialverläufe bei unterschiedlichen Teilchenauflösungen $\mathcal{A}$ (4.56) (Szenario I)	134
A.1	Beispiel für das Z-Ordnen im $\mathbb{R}^2$ . Die rote, gestrichelte Kurve ist die resultieren-	
	de Z-Kurve (beachte die Z-artige Linienführung). Der farbig kodierte Schlüssel	
	ist der im Bsp. (A.2) berechnete	144
$C_{1}$	Shinne des Deshenschietes eines eindimensionalen DIC Madalla einen Wand hei	
C.1	Skizze des Rechengebietes eines eindimensionalen PIC Modells einer wahd bei	151
	$x = 0  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots $	131
D.1	Auf 1 normierte Geschwindigkeitsverteilung der Teilchenquelle nach Emmert	
	et. al [2] mit den physikalischen Parametern aus Szenario I	153
D.2	Ionengeschwindigkeitsverteilungen nach Emmert et. al [2] mit den physikali-	
	schen Parametern aus Szenario I	155

# Tabellenverzeichnis

3.1	Physikalische Daten des Testteilchens	43
3.2	Analytische Daten für die Teilchenbewegung	43
4.1	Simulationsszenarios	73
4.2	Simulationsszenarios	73
4.3	Simulationsszenarios	74
5.1	Zusätzlicher Potentialgradient in der Vorschicht $\xi$ bei Neutralgasreibung	118
5.2	Schichtrelevante Vergleichswerte stoßfreier Systeme analog zu Tabelle 1.2 in	
	Stangeby [3]. Modelle/Spalten 1-6 nummeriert gemäß unterer Aufzählung. Ro-	
	te Werte kennzeichnen Ergebnisse eigener Simulationen	129
5.3	Schichtrelevante Vergleichswerte stößiger Systeme analog zu Tabelle 1.2 in	
	Stangeby [3]. Modelle/Spalten 7-11 nummeriert gemäß unterer Aufzählung.	
	Rote Werte kennzeichnen Ergebnisse eigener Simulationen	130
6.1	$\epsilon$ -Studie (Szenario I)	132
6.2	$\chi^2$ -Anpassungstests mit roten, kritischen Quantilen $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	136

## Kapitel 1

## Einleitung

Energie! Ein im wahrsten Sinne des Wortes elektrifizierender Begriff und wohl Inhalt einer der aktuell drängendsten Fragen der Menschheit [4]. Immer neue Technologien benötigen immer mehr und mehr Energie. Weiterhin machen aufstrebende Wirtschaftsnationen wie China, Indien und Brasilien mit ihren schnell wachsenden Volkswirtschaften das Problem zu einer globalen Fragestellung. Durch die schiere Größe ihrer Bevölkerungen sorgen sie außerdem dafür, dass der zusätzliche Energieverbrauch der Menschheit nicht alleine durch den Einsatz neuer energieeffizienter Technologien in den alten Industrienationen zu decken ist. Unter dem Druck schwindender fossiler Brennstoffe ist es unumgänglich, neue Energiequellen zu erschließen. Doch welche Bedingungen müssen an ein modernes, tragfähiges Energiekonzept gekoppelt werden? Politisch ist es erstrebenswert, die Versorgungsstrategien so auszurichten, dass Abhängigkeiten von zum Teil instabilen Weltregionen vermieden werden. Das heißt auch, dass etwaige Brennstoffe und Standorte global-demokratisch über den Globus verteilt und zugänglich sein müssen. Ein weiterer nicht zu vernachlässigender Standpunkt ist der wirtschaftliche. Für diese Sichtweise spielen Aspekte, wie günstige Verfügbarkeit der Energieträger und Technologien eine Rolle. Der schwerwiegendste Druck kommt wohl aber von umweltpolitischen Überlegungen. Mittlerweile ist es belegte Lehrmeinung, dass die weltweit immer weiter steigenden Durchschnittstemperaturen ein von Menschenhand selbstgeneriertes Problem sind. Dieser sogenannte Klimawandel wird bedingt durch den fortschreitenden Ausstoß von  $CO_2$ , welches beim Verbrennen fossiler Energieträger entsteht. Seine Folgen reichen je nach Weltregion von Überschwemmungen bis hin zu anhaltenden Dürren [5]. Deswegen ist es für zukünftige Versorgungsansätze unabdingbar, dass sie in der Produktion  $CO_2$ -neutral betrieben werden können.

Ein potentiell grundlastfähiger Ansatz, der allen diesen Ansprüchen gerecht werden könnte, ist die *Kernfusion* [6]. Damit bezeichnet man landläufig, Verschmelzungsreaktionen bei denen leichte Wasserstoffisotope unter Freisetzung von Bindungsenergie zu schwereren Elementen zusammengeführt werden. Die größte Erfolgswahrscheinlichkeit für die kommerzielle Nutzung verspricht man sich dabei von der Fusionsreaktion mit dem höchsten Wirkungsquerschnitt. Dabei handelt es sich um die Verschmelzung von Deuterium  ${}_{1}^{2}D^{+}$  und Tritium  ${}_{1}^{3}T^{+}$ , welche in der Fusionsreaktion

$${}_{1}^{2}D^{+} + {}_{1}^{3}T^{+} \rightarrow \alpha(3, 5 \text{ MeV}) + n(14, 1 \text{ MeV})$$

zu einem Heliumkern und einem hochenergetischen Neutron verschmelzen. Das Neutron könnte dabei technisch einfach aus dem zugrundeliegenden Reaktorkonzept ausgekoppelt und zur Stromgewinnung genutzt werden. Damit stellt sich die Fusion als neue nukleare Technologie ohne die bekannten und gesellschaftlich so kritisch betrachteten Nachteile bisheriger Fissionskraftwerke vor. Anders als bei der Kernspaltung sind die Edukte nicht stark radioaktiv. Damit schließt das Konzept auch jegliche militärische Nutzungsmöglichkeit aus und es ist auch keine selbsterhaltende Kettenreaktion notwendig, um die Fusion zu gewährleisten.

Um eine entsprechende Reaktion in ausreichenden Raten zu realisieren, muss das Deuterium-Tritium-Brennstoffgemisch in irdischen Reaktoren auf  $\propto 10$  keV aufgeheizt werden. Bei diesen Temperaturen liegen die Edukte in nahezu völlig ionisiertem Zustand vor und bilden ein sogenanntes *Plasma* [7]. Für erfolgreiche Fusionsreaktoren muss der heiße Brennstoff effektiv eingeschlossen werden. Wo dies auf der Sonne durch den eigenen Gravitationsdruck des Sterns selber geschieht, setzt man in terrestrischen Anlagen auf den Einschluss mittels Magnetfeldern. Als Güte der jeweils verfolgten Einschlussart gilt dabei das sogenannte Tripel-Produkt  $n \cdot T \cdot \tau_E$ . Wobei die Parameter der Reihe nach die *Plasmadichte n*, die *Plasmatemperatur T* und die *Energieeinschlusszeit*  $\tau_E$  sind [8]. Das zur Zeit diesbezüglich am weitesten fortgeschrittene Konzept ist das in Abbildung (1.1) skizzierte, sogenannte *TOKAMAK*-Prinzip (russisches Akronym für *Toroidale Kammer in Magnetspulen*) [9]. Mit diesem wurden bereits Werte von  $n \cdot T \cdot \tau_E$  in der Größenordnung  $10^{21} \text{ keV/s m}^3$  erreicht. Diese Werte liegen damit bereits im Bereich einer möglichen Zündung des Fusionsplasmas [10]. Die in dieser Linie nächste TOKAMAK-Maschine ist der sich aktuell im Bau befindliche Reaktor *ITER* (International *T*hermonuclear *Experimental Reactor*) [11, 12].

Mit der am 28. Juni 2005 erfolgten Übereinkunft

zu seinem Bau im südfranzösischen Cadarache [13] scheint der experimentelle "Weg" zum ersten Fusionskraftwerk *DEMO* (*DE-MO*nstration Power Plant) freigemacht.

Damit das ITER-Experiment die erhobenen hohen Erwartungen erfüllen kann, sind jedoch noch viele vorausgehende Fragen zu klären. In diesem Kontext hat sich in den letzten Jahrzehnten die Simulation mittels Computern als dritte Schiene in der physikalischen Forschung hervorgetan. Neben den klassischen Disziplinen Theorie und Experiment gewinnt diese neue Art des Erkenntnisgewinns mehr und mehr an Bedeutung. Ihr steigender Einfluss gerade im Bereich der Fusions- und Plasmaforschung [14, 15] wur-



Abbildung 1.1: Prinzipieller Aufbau eines Tokamaks

de erneut durch die 2009 erfolgte Inbetriebnahme des neuen Supercomputers *HPC-FF* (*H*igh *P*erformance *C*omputer *F*or *F*usion) [16] unterstrichen. Mit diesem Rechner steht nun erstmalig eine leistungsfähige Plattform für Simulationen strikt im Bereich der europäischen Fusionsforschung bereit.

Eine der fordernsten Aufgaben wird es dabei sein, durch Modellierung tieferes Verständnis über die Plasmarandschicht zu erlangen. Es ist zu erwarten, dass die Anforderungen an die nächste

Generation von Fusionsanlagen, im Gegensatz zum Plasmakern, in diesem Bereich nicht von bisher existierenden TOKAMAKs durch Ähnlichkeitsüberlegungen extrapolierbar sind. Die Physik der Plasmarandschicht [17] in modernen Fusionsanlagen reicht dabei von komplexen chemischen Prozessen bis hin zu turbulenten Flüssen. Zudem handelt es sich bei Berechnung der Randschicht eines magnetisch eingeschlossenen Fusionsplasmas um ein typisches Vielskalenproblem, mit der magnetischen Verbindungslänge  $L_c \approx 10 - 100$  m am einen Ende der relevanten Längenskala bis bin zur Debye-Länge  $\lambda_D \approx 10^{-6}$  m am anderen. Entsprechendes gilt für die Zeitskalen mit Bereichen von ms - s (radiale Diffusion in der Randschicht) bis hin zu  $10^{-12} - 10^{-11}$  s zur Auflösung der Plasmafrequenz in der elektrostatischen Schicht im Plasma-Wand Kontaktbereich. Entsprechend vielfältig sind die eingesetzten (und iterativ oder über an Schnittstellen tabellierte Größen vernetzten) Module in integrierten Simulationsprogrammen. Eine Vielzahl von etablierten linearen Randschicht-Simulationskonzepten sind inhärent gitterfrei, so alle auf Monte Carlo Techniken beruhenden Methoden, (z.B. EIRENE, EMC3, ERO). Nichtlineare gitterfreie Algorithmen, scheinen dagegen in diesem Anwendungsbreich nicht etabliert zu sein, obwohl sich damit die Vernetzung mit den bestehenden gitterfreien Codes viel natürlicher durchführen ließe. Ein besonders prominentes Beispiel für starke nichtlineare Effekte im wichtigen Plasma-Wand Kontaktbereich ist die Ausbildung des elektrostatischen Schichtpotentials (Raumladungseffekte) vor jeder dem Plasma ausgesetzten materiellen Fläche, und die damit verbundenen auch für technologische Fragen entscheidenden Größen wie Wärmeflüsse, Teilchen-Erosionsraten, prompte Redeposition von erodierten Wandatomen bereits auf dem ersten Larmor-Orbit. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit untersucht, ob und wie gitterfreie Algorithmen auch für die nahezu ab initio Simulation der Plasma-Wand Kontaktzone erweiterbar und verifizierbar sind. Gerade durch ihre geometrische Einfachheit und das geringe Maß an ad hoc Parametern scheinen sie besonders für die Plasmarandschicht aussichtsreiche Perspektiven zu bieten. Ein Vertreter dieser Klasse sind die sogenannten Tree-Codes. Der wissenschaftlichen Ursprung dieser Programme liegt in der Astrophysik. Jedoch haben sie sich in der jüngeren Vergangenheit zu einem sehr flexiblen Werkzeug in vielen Bereichen der Teilchen- und Molekulardynamik weiterentwickelt. Ein wichtiger Entwicklungszweig ist dabei die Anwendungen in der Laserplasmaphysik [18]. Für diesen Zweck wurde auch der Tree-Code PEPC-B (Pretty Efficient Parallel Coulomb solver) entwickelt [19], der zudem bereits massiv parallel arbeitet und damit an derzeitige und zukünftige Höchstleistungsrechnern bereits besonders gut angepasst ist. Die grundlegende Aufgabe von PEPC-B ist es das selbstkonsistente, elektrostatische Feld von einem Ensemble aus geladenen Teilchen zu berechnen und dann die Trajektorien aller Teilchen, unter Berücksichtigung zusätzlicher externer E- und B-Felder, zu verfolgen.

Es ist dabei sicherlich ein Ziel, PEPC-B als alleinstehendes Simulationskonzept für die Plasma-Wand-Wechselwirkung (PWW) zu erweitern, quasi im Sinne eines "virtuellen Plasma-Wand-Wechselwirkungs-Labors". Dazu müssen für Anwendungen auf magnetisch eingeschlossene Plasmen, neben Verifikation des Konzepts und Codes, zwei wesentliche Ergänzungen erarbeitet werden:

- 1.) Ein (extern vorgegebenes) Magnetfeld, und die Orbitintegration sowohl in voller Auflösung, als auch gegebenenfalls in der sogenannten Führungszentrumsnäherung.
- 2.) Eine materielle Wand, die sich selbstkonsistent mit den Plasmaflüssen und Plasmaraumladungseffekten auflädt.

Gerade letzteres stellt eine bislang offenbar noch nicht verfügbare oder untersuchte Randbedingung für Tree-Codes dar. Beide oben genannten Punkte wurden im Rahmen dieser Arbeit untersucht und, wie Vergleiche mit analytischen Lösungen für stark idealisierte Probleme zeigen, auch gelöst. Die Gliederung der vorliegenden Arbeit stellt sich damit wie folgt dar.

Zuerst (Kapitel 2) wird ein detaillierter Überblick über prinzipielle Komponenten von Tree-Codes im Allgemeinen und den massiv parallelen Aufbau von PEPC-B im Speziellen gegeben. Im Zuge dessen wird der Leser für die numerische Auswirkungen von genutzten Konstanten und Eingabeparameter bei fusionsrelevanten Simulationsszenarios sensibilisiert.

Als erste Erweiterung (Kapitel 3) von PEPC-B wird geschildert, wie der numerische Integrator, gestellt durch das sogenannte *Leap-Frog-Boris-Schema*, zu einem Führungszentrumsintegrator weiterentwickelt werden kann. Hierfür wird gezeigt, wie der existierende Integrator dazu verwendet werden kann, die Führungszentrumsgleichung erster Ordnung von Northrop [20] zu lösen. Anschließende Tests bestätigen, dass das neue Integrationskonzept entsprechende Driftorbits geladener Teilchen richtig wiedergibt. Es gelingt dabei die gesteigerte numerische Stabilität bezüglich der Zeitschrittweite zu belegen.

Als Nächstes (Kapitel 4) wird eine Möglichkeit diskutiert, inhärente Schwächen gitterfreier Methoden, wie etwa das Implementieren harter Randbedingungen, aufzuheben. Zu diesem Zweck wird ein neuartiges Konzept zur Darstellung fester Strukturen, wie etwa Divertorplatten oder Limiter entwickelt und erprobt.

Die Idee beruht auf der Beschreibung der Wand (des Randes) durch unbewegliche Ladungsträger. Um eine prinzipielle Verifikation dieses neuen *Wandteilchen-Konzepts* zu erhalten, wird ein 1d Plasma in Kontakt mit einer festen Wand und die dazugehörige Schichtphysik simuliert. In den entsprechenden Szenarios werden nahezu alle der zuvor neu erarbeiteten Module und Erkenntnisse zusammengeführt. Eine eingehende Analyse des Systems zeigt zum Einen gute Übereinstimmungen mit semianalytischen Arbeiten über die Schicht, zum Anderen ermöglicht das hohe Auflösungsvermögen neue Erkenntnisse bezüglich des dynamischen Aufbauprozesses einer stabilen Schicht. In diesem Zusammenhang zeigt sich, dass ad hoc Annahmen über die Konvergenz entsprechender Modelle [21] für verlässliche Resultate hinsichtlich der Schichtkinetik fundamental wichtig sind.

Im darauffolgenden Kapitel 5 wird das neue Modell dezidiert angewendet und ausgewertet. Zuerst wird die Kinetik der Elektronen über das ganze Simulationsgebiet untersucht. Es zeigt sich, dass die weitverbreitete Annahme überall im System thermalisierter Elektronen bestätigt wird. Es gelingt zusätzlich, das zuerst von Rayment und Twiddy [22] experimentell bestätigte Fehlen hochenergetischer Elektronen an der Schichtkante zweifelsfrei aufzulösen. Bei einer korrespondierenden Untersuchung der entscheidenden Ionenkinetik wurde eine Funktionenklasse zum Anpassen der kinetischen Ionenverteilung definiert, mit deren Hilfe die gewonnenen Verteilungsfunktionen sehr gut parametrisiert und mit wenigen Zahlen festgelegt ist.

Die gewonnenen Ionengeschwindigkeitsverteilungen an der Schichtkante stellen die wesentlichen Eckpunkte der Simulation dar. Sie werden detailliert der Arbeit von Emmert et. al [2] gegenübergestellt. Anschließend wird gezeigt, dass das vorgestellte Modell sich auch dazu eignet gedrehte B-Felder zu untersuchen. Dazu werden Szenarios mit entsprechenden magnetischen Vorschichten durchgeführt und mit der Theorie von Chodura [23] abgeglichen. Es wird herausgearbeitet, dass in der magnetischen Vorschicht, keine Drehung sondern eine zusätzliche Beschleunigung des Ionenflusses auf die Wand stattfindet. Darüberhinaus, wird das Modell so erweitert, dass stößige Randschichtmodelle untersucht werden können. Dazu werden in einem ersten Szenario Plasmaparameter so geändert, dass man Systeme mit intrinsischer CoulombStößigkeit der Ionen untersuchen kann. Damit ist es erstmals möglich, reibungsdominierte Vorschichten mit einem neutralen Gas zu simulieren. Der Vergleich mit vorherigen Arbeiten [24], welche nur auf einen *Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)-Operator* zugreifen konnten zeigt wenig Veränderung in schichtrelevanten Größen. Es bestätigt sich die Annahme, dass die eigentliche Schicht von der Viskosität in der Vorschicht weitestgehend unbeeinflusst bleibt. Um diesen Aspekt zu vertiefen wird ein neu entwickeltes Hintergrundreibungsmodell abgewandelt, um damit Schichtsimulationen mit Ladungsaustauschreibung zu simulieren. Erste Ergebnisse entsprechender Szenarios bestätigen die Annahme, dass der Potentialabfall in der Schicht sich nur wenig mit der Hintergrunddichte ändert. Es wird ferner belegt, dass die Abnahme der Plasmadichte bis zur Schichtkante fast um den Faktor 2 stärker ausfällt als bei stoßfreien oder viskosen Szenarios.

In einer Zusammenfassung werden abschließend die Ergebnisse bewertet, und es wir ein kurzer Ausblick auf weitere mögliche Anwendungen und nötige und mögliche Erweiterungen des Algorithmus gegeben.

## **Kapitel 2**

## **Grundlegende Methodik**

#### Das N Körperproblem - Eine königliche Frage 2.1

Es ist eine der am häufigsten wiederkehrenden Fragen der mathematischen Physik, das Verhalten einer großen Anzahl von Körpern zu bestimmen, die alle auf die gleiche Art miteinander wechselwirken (siehe Abb. (2.1)). Eine solche Wechselwirkung die alle Teilcheninteraktionen berücksichtigt nennt man eine selbstkonsistente Wechselwirkung. Die Notwendigkeit für deren Berechnung zieht sich von der Astrophysik über die Elektrodynamik bis hin in die Quantenmechanik und der dort eingeführten, sogenannten zweiten Quantisierung.

Eines der ersten Beispiele für die wissenschaftliche Formulierung eines solchen Problems findet sich in dem 1885 von Magnus Gösta Mittag Leffler betreuten mathematischen Preisausschreiben, für welches König Oscar II von Schweden die Schirmherrschaft trug [25].

Das dort geschilderte Problem bezieht sich zwar noch explizit auf das Newtonsche Gravitationspotential und die daraus ableitbaren klassischen Planetenbewegungen, jedoch lässt sich die Fragestellung beliebig auf andere Bereiche der Physik und andere Potentiale verallgemeinern.

Im Rahmen dieser Arbeit soll, wenn von einem N Körperproblem die Rede ist, stets das elektrostatische Coulomb-Problem gemeint sein. Konkret bedeutet dies, dass man ein Ensemble aus N geladenen Teilchen, welche über ein 1/r Potential miteinander wechselwirken, betrachtet. Das heißt die Stärke mit der sich unterschiedlich geladene Teilchen anziehen oder gleichnamig geladene Teilchen Abbildung 2.1: Bsp. vier Körper die miteinander abstoßen, nimmt mit zunehmendem Abstand r der Teilchen linear reziprok zu diesem ab.



selbstkonsistent wechselwirken

Unter diesen Voraussetzungen ergibt sich das Potential  $\phi$ , welches am Ort  $\vec{x}_j$  von Teilchen j aufgrund der elektrostatischen Wechselwirkung mit allen anderen Teilchen  $(i = 1, ..., N; i \neq j)$ wirksam ist, durch die sogenannte Coulomb-Summe

$$\phi(\vec{x}_j) = f \cdot \sum_{i \neq j} \frac{q_i}{\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|}$$
(2.1)

Wobei die Konstante f vom gewählten Einheitensystem abhängt und  $q_i$  die Ladung von Teilchen i ist.

Anhand von Gleichung (2.1) sieht man die typische Struktur eines N Körperproblems. Das Potential an der Stelle des *j*-ten Körpers erhält man durch die lineare Superposition der Wechselwirkungen mit allen (N-1) verbleibenden Körpern. Dies hat zur Folge, dass die Berechnung des selbstkonsistenten Potentials für ein Teilchen  $\mathcal{O}(N)$  Rechenoperationen erfordert. Die Berechnung des Potentials an allen N Teilchenpositionen bedingt somit einen Rechenaufwand in der Größenordnung  $\mathcal{O}(N^2)$ .

In vielen Simulationsszenarios, wie sie etwa durch die Astro- oder die Plasmaphysik vorgegeben werden, ist mindestens  $N \propto 10^5 - 10^6$  anzusetzen. Damit wäre die Komplexität solcher Systeme selbst durch den Einsatz moderner Supercomputer und parallelisierter Programmverläufe mittels der Exhaustionsmethode (*Brute-Force-Methode* oder *direkte Summation*) nicht zu bewältigen (siehe auch II.A in [15]).

Um dennoch in vertretbaren Zeiten zu belastbaren Ergebnissen zu kommen, ist es deshalb unabdingbar, numerische Methoden zu entwickeln, welche das durch (2.1) beschriebene Summationsproblem mit geringerem Aufwand und kleinem Fehler annähern. Bei Problemen aus der Elektrodynamik oder Elektrostatik, wie sie etwa die Plasmaphysik stellt, haben sich zu diesem Zweck in der Vergangenheit drei Methoden hervorgetan:

- 1.) Particle In Cell (PIC) Methode [1, 26].
- 2.) Fast Multipol Method (FMM) [27].
- 3.) Tree-Codes [28, 29, 30].

Bei Methode 1.) handelt es sich um eine gitterbasierte Methode. Die grundlegende Idee von PIC-Codes ist es, die Teilcheneigenschaften, wie etwa die Teilchenladungen, zunächst numerisch gewichtet auf die einzelnen Punkte eines Simulationgitters zu projizieren und die gesuchten Größen, wie beispielsweise das selbstkonsistente Potential, nur an diesen Gitterpunkten zu berechnen. Das Ergebnis wird dann wieder mittels der Gewichte auf die Teilchenpositionen zurückübertragen.

Algorithmus 2.) und 3.) verzichten darauf, das Simulationsgebiet mit einem Gitter zu hinterlegen. Man nennt sie deshalb auch *gitterfreie Methoden*. Stattdessen wird eine geschickte Buchhaltungsstruktur in Form eines Baumes angelegt. Anhand dieses Baumes wird dann entschieden, welche Teilchen sich so "nahe" sind, dass die Wechselwirkung exakt ausgerechnet wird und welche Teilchengruppierungen "weit genug" voneinander entfernt sind, so dass sie zu "Pseudoteilchen" zusammengefasst werden können. Natürlich muss noch eindeutig definiert werden, was in diesem Zusammenhang mit "nah" und "weit genug entfernt" konkret gemeint ist. Diese und weitere Fragen sollen in den folgenden Abschnitten behandelt werden. Aufgrund mangelnder Anwendungen im Bereich dynamischer Simulationen, soll die FMM in den weiteren Betrachtungen ausgeklammert werden. Für eine gute Einführung und eine adäquate Abgrenzung gegenüber Tree-Codes kann Kapitel sieben in [29] konsultiert werden.

Das Fundament der folgenden Betrachtungen, Weiterentwicklungen und Anwendungen ist der Tree-Code PEPC-B (Pretty Efficient Parallel Coulomb solver) [31]. Dieses massiv parallele

Programm wurde bisher hauptsächlich für selbstkonsistente Teilchensimulationen im Bereich der Laserplasmen eingesetzt. Wie in der Einleitung bereits angedeutet liegt die Attraktivität von Tree-Codes unter anderem in ihrer unkomplizierten Anpassung an komplexe Geometrien, ihrer intrinsischen Mitbehandlung von Coulomb-Stößen und ihrem hohen Auflösungsvermögen. Drei Umstände die sie besonders für die Simulation der Plasma-Randschicht interessant erscheinen lassen. Sie könnten mit ihren Fähigkeiten als vollkinetisches Simulationswerkzeug im Ensemble der Plasmarandschicht-Codes wichtige Erkenntnisse über bisher nur als ad hoc Annahmen verfügbare Eingabeparameter liefern. Dazu wird zunächst in den nächsten Abschnitten die prinzipielle Arbeitsweise von PEPC-B erläutert. Alle die hier getroffenen Aussagen, sind dann als Fundament für die darauffolgenden Erweiterungen und Neuerungen im Programm zu begreifen.

## 2.2 Baumalgorithmen

Die ursprüngliche Idee für Tree-Codes geht auf Barnes und Hut [28] zurück. Die Autoren lösen die Aufgabe, die selbstkonsistente Wechselwirkung einer Sternenansammlung zu berechnen. Seit dieser Zeit wurde die Methode stets weiterentwickelt und verfeinert. Jedoch ist der prinzipielle Ablauf von gitterfreien Methoden stets gleich. Er gliedert sich in zwei Hauptaufgaben.

- I.) Aufbau der internen Datenstruktur (Baum).
- II.) Auswerten der Datenstruktur und Berechnen der selbstkonsistenten Wechselwirkung.

Diese zwei Teile sollen nun im Folgenden näher beleuchtet werden.

### 2.2.1 Aufbauen des Baumes

Wie bereits erwähnt, ist die erste Aufgabe der algorithmische Aufbau der Datenstruktur zur internen Teilchenverwaltung. Diese Datenstruktur ist, wie des öfteren schon angekündigt und der Name der Code-Klasse vermuten lässt, ein Graph, welcher sich als Baum visualisieren lässt. An dieser Stelle wird der Übersichtlichkeit dadurch Rechnung getragen, dass die zur Erläuterung herangezogenen Beispiele alle zweidimensional (2d) sind. Dies macht sich hauptsächlich dadurch bemerkbar, dass die beschriebenen Bäume stets Quartbäume sind. Simulationen in drei Dimensionen werden dementsprechend Oktalbäume bedingen. Das bedeutet, dass jeder Knoten höchstens acht Kinder hat.

Des Weiteren wird in diesem und den darauf folgenden Kapiteln der weitverbreiteten Konvention, Bäume auf dem Kopf stehend darzustellen, Folge geleistet. Das bedeutet, dass wenn von der Baumwurzel die Rede ist, stets das oberste Baumlevel (Level 0 siehe auch Anhang Abb. (A.1)) gemeint ist, wohingegen die Blätter im untersten Baumniveau anzusiedeln sind (vgl. Abb. (2.2) rechts).

Der Aufbau des Baumes läuft schrittweise nach folgendem Schema ab:

1. Als Startpunkt seien Teilchen in einem Simulationsgebiet an beliebigen Orten gegeben (schwarze Punkte in Abb. (2.2) links). Diese werden im ersten Schritt in einer grundlegenden Simulationsbox (schwarze Box in Abb. (2.2)) der Kantenlänge *a* zusammenge-



Abbildung 2.2: Bsp. Aufteilung eines 2d Simulationsgebietes (links). Daraus resultierender Quartbaum (rechts). Die Gebiete links werden farblich kodiert, mathematisch positiv den Baumknoten rechts zugeordnet

fasst. Kollektive physikalische Eigenschaften der Teilchen, wie etwa Gesamtmasse und -ladung sowie Koordinaten des Ladungsschwerpunktes als auch Multipole der diskreten Ladungsverteilung in der Box, werden berechnet und in einer geeigneten Weise (siehe etwa [29]) im Speicher dem Wurzelknoten zugeordnet.

2. Im nächsten Schritt wird die Simulationsbox in jeder Raumdimension halbiert. Sind die so entstandenen neuen Boxen der Größe a/2 (blaue Kästchen in Abb. (2.2) links) nicht leer, so werden die relevanten, physikalischen Parameter berechnet und wie schon beim Wurzelknoten in entsprechende Baumknoten (blaue Knoten in Abb. (2.2) rechts) gespeichert.

Diese Knoten kann man als Zusammenfassung der Ladungsverteilung in der entsprechenden *Unterbox* zu einem *Pseudoteilchen* verstehen. Dieses Pseudoteilchen ist dann im physikalischen Kontext an der Stelle des Ladungsschwerpunktes situiert und vereinigt auf sich die für die weitere Berechnung relevanten physikalischen Merkmale der gesamten Ladungsverteilung in der Unterbox, wie etwa die elektrostatischen Multipole.

- 3. Jeder weitere Schritt des Baumaufbaus läuft dann dem selben Schema folgend ebenso ab. Stets werden die aktuellen Unterboxen in jeder Raumdimension halbiert (nach den blauen Kästchen in Abb. (2.2) links folgen somit die roten) und die so neu entstehenden Boxen daraufhin überprüft, ob sie tatsächlich Teilchen enthalten. Ist dies der Fall, werden die relevanten Daten in einem neuen Baumknoten auf dem nächst darunterliegenden Level abgelegt (in Abb. (2.2) rechts sind diese unterhalb der blauen Knoten die roten Knoten).
- 4. Diese Arbeitsschritte werden so oft wiederholt, bis die zuletzt entstandenen Baumknoten jeweils nur noch ein Teilchen beinhalten. Im in Skizze (2.2) illustrierten Beispiel ist das spätestens nach dem dritten, grünen Niveau der Fall. Die so entstehenden Einteilchenknoten stellen somit die Blätter des Baumes.

Als Abschluss dieses Abschnitts sei nochmals erwähnt, dass es sich bei dem hier aufgebauten Gitter, im Unterschied zu beispielsweise PIC-Codes, nicht um ein Rechengitter handelt. Es dient nur dem Aufbau der internen Buchhaltungsstruktur und schränkt somit die Geometrie des Simulationsgebietes in keiner Weise ein.

### 2.2.2 Auswerten des Baumes

Im vorangehenden Paragraphen wurde gezeigt, nach welchem Schema aus einer diskreten Ladungsverteilung ein Baum aufgebaut wird. Nun ist zu klären, inwiefern eine solche Baumstruktur bei der Berechnung einer Coulomb-Summe (2.1) von Vorteil sein kann. Die Erläuterung der Antwort erfolgt erneut anhand eines zweidimensionalen Beispiels. Konkret ist der zugrundeliegende Baum der im vorangegangen Paragraphen 2.2.1 aufgestellte.

In dem bereits vorgestellten Teilchenensemble sei nun exemplarisch die elektrostatische Coulomb-Kraft auf das Teilchen an der Stelle  $\vec{R}$  (vgl. Abb. (2.3) links) gesucht.



**Abbildung 2.3:** Schematische Feldberechnung: Weit entfernte Ensemble (blauer Kreis) werden als Multipol-, nahe als Monopol berücksichtigt

Wie bereits in der Einleitung zum vorliegenden Abschnitt erwähnt wurde, ist für die Wechselwirkungsbestimmung entscheidend, ob eine Untergruppe des ursprünglichen Teilchenensembles "nahe" oder "weit entfernt" vom Berechnungspunkt  $\vec{R}$  liegt. Um dies zu entscheiden, bemüht der Code ein sogenanntes *Öffnungs*- oder *MAC-Kriterium* (*Multipole Acceptance Criterion*). Für alle Anwendungen wie sie in der vorliegenden Arbeit diskutiert werden, ist dies das ursprüngliche, von Barnes und Hut [28] eingeführte Öffnungskriterium (Bezeichnungen aus Abb. (2.3))

$$\frac{L}{D} \geqq \Theta \tag{2.2}$$

Andere Ansätze für Kriterien können etwa [32] entnommen werden. In Gleichung (2.2) ist  $\Theta$  dabei ein zunächst beliebiger ad hoc festgelegter Wert. Wie zu erwarten ist, hat seine Wahl Einfluss auf die Genauigkeit der Potentialberechnung. Jedoch ist es nicht trivial, die Auswirkungen eines veränderten  $\Theta$  isoliert, ohne Hinblick auf die Multipolentwicklung zu diskutieren. Deshalb wird separiert in Abschnitt 2.2.4 eine entsprechende Diskussion angedeutet. Im Moment genügt es zu bemerken, dass typischerweise  $\Theta \approx 0, 4$  gewählt wird. Ist nun

$$\frac{L}{D} \stackrel{!}{\cong} \Theta \tag{2.3}$$

So gilt die Unterbox als nahe und damit das Öffnungskriterium als erfüllt. Andererseits wird sie für

$$\frac{L}{D} \stackrel{!}{\leq} \Theta \tag{2.4}$$

als weit entfernt eingestuft.

Wie man an Gleichung (2.2) sieht, setzt das Öffnungskriterium den Abstand vom Berechnungspunkt zum Ladungsschwerpunkt D mit der Größe der Unterbox L in Relation. Demzufolge werden Unterboxen in großem Abstand (D groß), die zusätzlich noch klein (L klein) sind, als weit entfernt angesehen. Andersherum sind naheliegende (D klein), ausgedehnte (L groß) Unterboxen nahe und erfüllen das Öffnungskriterium. Letztere werden dementsprechend geöffnet, was soviel heißt, als dass sie in ihre Unterboxen aufgelöst und diese nun einer erneuten Prüfung mit dem Öffnungskriterium unterzogen werden.

Ist nun eine Unterbox weit genug entfernt, so dass sie nicht weiter aufgelöst werden muss (z.B. das Teilchenensemble/Pseudoteilchen im blauen Kreis in Abb. (2.3)), so gruppiert der Code das entsprechende Teilchenensemble zu einem Pseudoteilchen mit Multipolen an der Stelle des Ladungsschwerpunktes zusammen. Die hierfür benötigten, physikalischen Daten (Multipole, Gesamtladung, Ladungsschwerpunkt ...) werden dabei aus dem entsprechenden Knoten im Baum ausgelesen (vgl. gepunktete, blaue Linie in Abb. (2.3)).

Das Programm arbeitet sich dabei von der Wurzel nach unten vor und entscheidet bei jeder Wechselwirkungsberechnung, in wie weit die einzelnen Zweige aufgelöst werden müssen. Auf dem untersten Level bedeutet dies, dass wenn ein einzelnes Teilchen sehr nahe ist, wird der entsprechende Zweig bis zum Blatt-Knoten aufgelöst (gepunktete, rote Linie in Abb. (2.3)). Die so resultierende Nahfeldwechselwirkung ist dann die echte, Coulomb, Monopol-Monopol Interaktion.

Das Festlegen, wie ein Teilchen mit dem Restensemble wechselwirkt, also wie der Code die (N-1) Teilchen in Pseudoteilchen aufteilt, um die Wechselwirkung auf ein einzelnes Teilchen zu berechnen, nennt man *Festlegen der Interaktionslisten*. In PEPC-B geschieht dies in der Routine **tree\_walk**. Stehen diese fest, so werden sie dementsprechend ausgewertet und die gesuchten physikalischen Größen wie selbstkonsistentes Potential oder elektrisches Feld berechnet. Dies geschieht in **sum\_force**.

### 2.2.3 Rechenaufwand

Der für Aufbauen und Auswerten des Baumes zu veranschlagende Rechenaufwand hängt prinzipiell natürlich von der räumlichen Verteilung der Teilchen im Rechengebiet ab. Ein Szenario bestehend aus mehreren, räumlich getrennten Teilchenverbünden wird mehr Aufwand einfordern als ein Ensemble, welches aus nur einem Haufen besteht.

Wie in [28] mittels einfacher Abschätzungen diskutiert wird, bedingen die meisten Rechengebiete und Teilchenmengen der Mächtigkeit N für den Aufbau des Baumes einen Rechenaufwand A von

$$\mathbf{A} \propto \mathcal{O}(N\log(N)) \tag{2.5}$$

Gleiches gilt für das Auswerten des Baumes. Damit gibt Relation (2.5) den Aufwand für den gesamten Tree-Code. Der Gewinn der gitterfreien Methode gegenüber der direkten Summation

 $(\mathbf{A} \propto \mathcal{O}(N^2))$  an Rechenaufwand steht somit fest. Allerdings bleibt zu konstatieren, dass den Abschätzungen, welche zu (2.5) führen, keine zwingenden, mathematischen Axiome zugrunde liegen. Das bedeutet, dass sehr wohl, wenn auch eher pathologische Rechenszenarios denkbar sind, welche einen signifikant höheren Aufwand als  $\mathcal{O}(N \log(N))$  bedingen.

### 2.2.4 Numerischer Fehler

Wie alle numerischen Methoden sind selbstverständlich auch Tree-Codes mit inhärenten, verfahrensabhängigen Fehlern behaftet. Wie bereits angedeutet, hängen diese Ungenauigkeiten unter Anderem mit der Wahl des Öffnungsparameters  $\Theta$  zusammen. Wird dieser kleiner gewählt, erfüllen mehr Boxen das Öffnungskriterium (2.2) und werden entsprechend feiner aufgelöst. Man antizipiert also einen abnehmenden Fehler. Gleichzeitig bleibt aber zu bedenken, dass mit abnehmenden  $\Theta$  die Anzahl der zu berechnenden Wechselwirkungen stark zunimmt. Dieses Zunahme ist in der Größenordnung ~  $\Theta^{-3}$  [29] zu veranschlagen. Das bedeutet, dass ab einem gewissen Punkt der Gewinn an Genauigkeit mit einem sehr hohen Preis an Rechenzeit bezahlt werden muss (vgl. Abb. 4.11 in [29]).

Ein oftmals praktikablerer Weg, die Genauigkeit zu erhöhen, ist es deshalb, die Multipolentwicklung der Pseudoteilchen mit höheren Ordnungen zu berücksichtigen. In wiefern diese Option bis zu einem gewissen Grad effektiver ist als stur  $\Theta$  zu verkleinern, ist den Abbildungen 1 (a) und 1 (b) in [33] zu entnehmen. Jedoch ist eine generelle Regel wie ein möglichst hoher Gewinn an Genauigkeit mit einem möglichst minimalen Zuwachs an Rechenzeit zu erzielen ist, kaum ableitbar [34].

In PEPC-B ist die entsprechende Entwicklung bis zum Quadrupolmoment realisiert. Dies ist völlig ausreichend, da der gesamte Fehler der Ergebnisse, vom numerisch schwächsten Teil des Codes bedingt wird. Dies ist bei PEPC-B, wie bei fast allen anderen kinetischen Methoden, der Zeitintegrator (siehe Abschnitt 3). An diesen stellt man meist nur die schlichte Bedingung, dass er schnell und explizit sein muss [26]. Dies hat zur Folge, dass oft explizite Integratoren erster oder höchstens zweiter Ordnung Verwendung finden. Dem zufolge würde in der Praxis ein wesentlich genauer berechnetes Potential durch den numerisch ungenauen Integrator oder unzureichende Teilchenstatistiken (vgl. Abschnitt 6.2) zunichte gemacht werden.

Prinzipiell ist es schwer, eine mathematische Fehlerabschätzung für die Potentialberechung in Tree-Codes zu geben [35]. Ein Grund hierfür, ist der Umstand, dass das Öffnungskriterium an keine Fehlerschranke gekoppelt ist. Stattdessen bedient man sich eines ad hoc eingeführten Wertes für  $\Theta$ . Methodisch sind deshalb auch andere, verbesserte Öffnungskriterien untersucht worden [32].

### 2.2.4.1 Fehler bei der Simulation einer Gasinjektion

Der Einfluss von  $\Theta$  auf das Resultat einer Simulation hängt stark vom zugrundeliegenden Szenario ab. Das heißt, er ist a priori schwer zu bewerten. So sind beispielsweise viele der oben zitierten Resultate aus dem Bereich der Astrophysik. Für Tree-Code-Anwendugen in der Plasmaphysik gibt es nahezu keine solche Bewertungen und speziell in der Fusionsforschung fehlen sie gänzlich. Aus diesem Grund soll hier die Auswirkungen von  $\Theta$  erstmals auf ein realistisches Fusionsszenario geklärt werden. Als zugrundeliegendes Modell dient dafür die Simulation einer Gasinjektion (*gas-puff* wie dies auch in [36] diskutiert wurde). Bei solchen Experimenten werden durch kleine Öffnungen (siehe Abb. (2.4)) in bestimmten Teilen des Vakuumgefäßes chemische Elemente in das Fusionsplasma geblasen. Die Einsatzbreite dieser Verfahren reicht von einfachen Spektroskopieexperimenten [37] bis hin zu massiven Gasinjektionen zur Verhinderung von Disruptionen (*Disruption Mitigation Valve*) in TOKAMAKs [38]. Um das Verhalten dieser künstlich eingebrachten Teilchen im Plasma in Theorie und Simulation richtig wiederzugeben, müssen etwaige Simulationsprogramme alle physikalisch relevanten Effekte richtig wiedergeben können.

Gerade das selbstkonsistente E-Feld der eingeblasenen Teilchen könnte eine entscheidende Rolle für die Redeposition der chemischen Elemente auf der TOKAMAK Innenwand spielen [39, 40]. Da aber nahezu alle derzeit verfügbaren Simulationsmethoden dieses aussparen, könnte hier eine mögliche Anwendung von Tree-Codes in der Fusionsforschung liegen. Aufgrund ihrer gitterfreien Doktrin könnten sie relativ unkompliziert an bestehende Codes, wie etwa EIRENE [41], als Zusatzmodul gekoppelt werden.



Abbildung 2.4: Schräger Limiter aus TEXTOR mit Öffnung zum Einblasen chemischer Elemente

Hier soll nun ein entsprechendes Injektions-

modell bezüglich der Fehler in der Potentialberechnung betrachtet werden. Grundlage sind Ionisationsorte und Ladungen, wie sie beim Einblasen von zunächst neutralem Kohlenwasserstoff  $(CH_4)$  entstehen (siehe Abb. (2.5) und (2.6)).



Abbildung2.5:Kohlenstoffionen  $C^+$  (blau)Abbildung2.6:Draufsicht auf Abbildungund Elektronen (rot) für die Simulation einer(2.5). Die schwarze Fläche ist die Limiterober-<br/>flächeGasinjektionfläche

Berechnet wurden diese von EIRENE und durch eine neue Schnittstelle (EIRENEtoPEPC) an PEPC-B weitergereicht, wo sie als Startparameter einer entsprechenden Simulation dienen. Um die  $\Theta$ -Abhängigkeit auf das selbstkonsistente Potential zu bewerten, wurde das gesamte Potential  $\phi_{ges}$  von N = 5000 Ionen im Schwarm berechnet.

$$\phi_{ges} := \sum_{i=1}^{N} \phi_i \tag{2.6}$$

Wobei  $\phi_i$  das selbstkonsistente Potential des *i*-ten Ions durch alle anderen  $(j = 1, ..., 5000; j \neq i)$  Ionen ist. Damit ist  $\phi_{ges}$  eine, mit der Ladung, renormierte Selbstenergie des Systems. Für diesen Test wurden keine Elektronen in die Simulation gegeben. Als Referenzpotential  $\phi_{ges}^{bf}$  wird das Potential einmal durch direkte Summation ermittelt.

$$\phi_{ges}^{bf} := \sum_{i=1}^{N} \left( \sum_{\substack{j=1\\j \neq i}}^{N} f \frac{q_j}{\|\vec{x}_j - \vec{x}_i\|} \right)$$
(2.7)

Mittels  $f = 1/4\pi\varepsilon_0$  wurde das SI-Einheitensystem festgelegt. Es ergibt sich

$$\phi_{ges}^{bf} \approx 1,64387 \,\mathrm{V}$$
 (2.8)

Im Vergleich mit den Potentialen  $\phi_{ges}^{PEPC}(\Theta)$ , welche PEPC-B berechnet, wird nun der relative Fehler

$$\delta_{\phi} := \frac{\left|\phi_{ges}^{PEPC}(\Theta) - \phi_{ges}^{bf}\right|}{\phi_{ges}^{bf}}$$
(2.9)

gegenüber  $\Theta$  aufgetragen.



**Abbildung 2.7:** Relativer Fehler  $\delta_{\phi}$  gegenüber  $\Theta$ 

Man sieht anhand von Graph (2.7) eindeutig, dass der Fehler schon praktisch durchweg weit unter 1 % liegt. Für  $\Theta = 0$  errechnet PEPC-B definitionsgemäß alle Wechselwirkungen und der Wert  $\phi_{ges}^{PEPC}(0)$  stimmt bis auf Maschinengenauigkeit mit der direkten Summation (2.8) überein. Sichtbar ansteigen tut der Wert für  $\delta_{\phi}$  jedoch erst ab  $\Theta \ge 0, 8$ . Davor rauscht er nur etwas. Doch selbst für  $\Theta = 1$  ist der relative Fehler in der gewählten Prüfgröße noch sehr klein. Sie ist also interessanter Weise äußerst unabhängig gegenüber  $\Theta$ .

Am gleichen Modell lässt sich auch der Einfluss der weiter unten Plummer-Konstante  $\epsilon$  aus Gleichung (2.10) bewerten. Dafür wird diese bei  $\Theta = 0, 6$  variiert. Die Ergebnisse dieser Testreihe können Abbildung (2.8) entnommen werden.



Abbildung 2.8: Relativer Fehler  $\delta_{\phi}$  gegenüber  $\epsilon/\bar{\iota}$  ( $\theta \sim 0, 6$ )

Dabei ist der relative Fehler über dem Verhältnis  $\epsilon/\bar{\iota}$  mit dem mittleren Teilchenabstand  $\bar{l} \approx 2 \cdot 10^{-4}$  m aufgetragen. Man sieht auch hier, dass für das gewählte Beispiel  $\epsilon$  als unkritisch betrachtet werden kann wenn  $\frac{\epsilon}{\bar{l}} \leq 0, 1$  (vgl. auch Ergebnis (6.3)). Interessanterweise scheinen die Anforderungen an diesen Parameter schwach.

Eine weitere Studie des Einflusses von  $\epsilon$  ist Abschnitt 6.1 zu entnehmen.

### 2.2.5 Multipolentwicklung in PEPC-B

Einer der wichtigsten Bestandteile der gitterfreien Methode ist die Multipolentwicklung des jeweiligen Potentialkerns. Wie im letzten Abschnitt 2.2.4 bemerkt, steigert die Hinzunahme von mehr Multipolen die Genauigkeit der Potentialberechnung. Für elektrostatische Berechnungen mit PEPC-B wird das *Plummer-Potential* (2.10) an der Stelle x für eine Ladungsverteilung im Volumen V (vgl. Skizze (2.9)) berücksichtigt.

$$\phi(\vec{x}) = f \int_{V} \frac{\rho_{el}(\vec{x}\,')}{\sqrt{|\vec{x} - \vec{x}\,'|^2 + \epsilon^2}} \, d^3(\vec{x}\,') \tag{2.10}$$

Dabei legt die Konstante f wie gehabt das Einheitensystem fest. Der eigentliche Ursprung für das Plummer-Potential liegt in der Astrophysik. Es unterscheidet sich vom tatsächlichen Coulomb-Potential (2.1) nur durch die numerische Glättungskonstante  $\epsilon$ . Sie wird eingeführt, um die Singularität im Nullpunkt ( $|\vec{x} - \vec{x}'| \ll 1$ ) abzufangen. Diese würde, falls sich zwei Teilchen zu nahe kommen, ein für den Rechner nicht mehr darstellbares Potential bedingen und so den Code instabil machen. Ein weiteres Problem taucht bei der dynamischen Simulation stößiger Systeme auf. Aufgrund einer endlichen Zeitschrittweite  $\Delta t$  des Integrators können bei unbedachter Wahl von  $\epsilon$  fehlerhafte Teilchenpositionen und Geschwindigkeiten generiert werden (siehe etwa Kapitel 3.1 in [29] oder Abschnitt 6.1). Die Wahl von  $\epsilon$  gerade bei stößigen Systemen ist also prinzipiell auch von  $\Delta t$  abhängig. Generell gilt als Ansatzpunkt  $\epsilon \lesssim \mathcal{L}$  wobei  $\mathcal{L}$  die kleinste relevante Länge des Simulationszenarios ist (vgl. Darstellung (2.8)). Für die Rechenpraxis in der Plasmaphysik ist daher meist zu beachten, dass  $\epsilon \lesssim \overline{l}$  gesetzt wird (vgl. auch Abschnitt 6.1). Hierbei ist  $\overline{l}$  der mittlere Teilchenabstand der Simulationsteilchen.



**Abbildung 2.9:** Ladungsverteilung im Volumen V und Integrationsvariable  $\vec{x}'$ 

Die eigentliche Multipolentwicklung in PEPC-B ist in kartesischen Koordinaten realisiert und wird bis zum Quadrupolterm durchgeführt [29]. Sie ist damit einfach durch eine mehrdimensionale Taylorentwicklung des Integralkerns aus (2.10) bis zur zweiten Ordnung zu realisieren. Doch anders als in den meisten Standardwerken [42] entspricht die Multipolentwicklung auf einem beliebigen Level oberhalb der Blätter in PEPC-B nicht der um den kanonischen Entwicklungspunkt  $\vec{x}' = 0$ . Um die eigentliche Entwicklung zu erhalten, schreibt man (2.10) zunächst wie folgt um

$$\phi(\vec{x}) = f \int_{V} \frac{\rho_{el}(\vec{r})}{\sqrt{|\vec{x} - \vec{R} - \vec{r}|^2 + \epsilon^2}} d^3(\vec{r})$$
(2.11)

wobei  $\vec{R}$  der Ortsvektor des Ladungsschwerpunktes von V ist (Abb. (2.9)). Man entwickelt nun um  $\vec{r} = 0$  bis zur zweiten Ordnung [29, 42]

$$\phi(\vec{x}) \stackrel{=}{=} f \int_{V} \rho_{el}(\vec{r}) \left( \frac{1}{\sqrt{|\vec{x} - \vec{R} - \vec{r}|^{2} + \epsilon^{2}}} \Big|_{\vec{r}=0} + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial r_{i}} \frac{1}{\sqrt{|\vec{x} - \vec{R} - \vec{r}|^{2} + \epsilon^{2}}} \Big|_{\vec{r}=0} \cdot r_{i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3} \frac{\partial^{2}}{\partial r_{i} \partial r_{j}} \frac{1}{\sqrt{|\vec{x} - \vec{R} - \vec{r}|^{2} + \epsilon^{2}}} \Big|_{\vec{r}=0} \cdot r_{i} r_{j} \right) d^{3}(\vec{r})$$

$$(2.12)$$

Eine Standardrechnung liefert in zweiter Ordnung

$$\phi(\vec{x}) = f \int_{V} \rho_{el}(\vec{r}) \left( \frac{1}{\sqrt{|\vec{x} - \vec{R}|^{2} + \epsilon^{2}}} + \sum_{i=1}^{3} \frac{x_{i} - R_{i}}{\left(|\vec{x} - \vec{R}|^{2} + \epsilon^{2}\right)^{3/2}} \cdot r_{i} \right)$$

$$= M(\vec{x}, \vec{R}) = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} - R_{i})(x_{i} - R_{i}) - \delta_{ii}}\right)} = \sum_{i=1}^{3} \frac{1}{\left(3(x_{i} -$$

$$+ \sum_{i,j=1}^{3} \underbrace{\frac{1}{2} \left( \frac{3(x_i - R_i)(x_j - R_j)}{\left( |\vec{x} - \vec{R}|^2 + \epsilon^2 \right)^{5/2}} - \frac{\delta_{ij}}{\left( |\vec{x} - \vec{R}|^2 + \epsilon^2 \right)^{3/2}} \right)}_{:= C_{ij}(\vec{x},\vec{R})} \cdot r_i r_j d^3(\vec{r}) (2.13)$$

Für eine anwendungsrelevante, diskrete Ladungsverteilung aus NLadungen  $q_l$  an den Stellen  $\vec{r}^{\;(l)}$  ; l=1,...,N ist

$$\rho_{el}(\vec{r}) = \sum_{l=1}^{N} q_l \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}^{(l)})$$
(2.14)

Damit wird aus (2.13)

$$\phi(\vec{x}) = f \left( M(\vec{x}, \vec{R}) \cdot \sum_{\substack{l=1\\i=Q}}^{N} q_l + \sum_{i=1}^{3} D_i(\vec{x}, \vec{R}) \cdot \sum_{\substack{l=1\\i=P_i}}^{N} q_l r_i^{(l)} + \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(\vec{x}, \vec{R}) \cdot \sum_{\substack{l=1\\i=T_{ij}}}^{N} q_l r_i^{(l)} r_j^{(l)} \right)$$

$$(2.15)$$

Oder verkürzt

$$\phi(\vec{x}) = f \left(\underbrace{M(\vec{x}, \vec{R}) \cdot Q}_{\text{Monopolterm: I}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{3} D_i(\vec{x}, \vec{R}) \cdot P_i}_{\text{Dipolterm: II}} + \underbrace{\sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(\vec{x}, \vec{R}) \cdot T_{ij}}_{\text{Jipolterm: II}}\right)$$
(6)

Quadrupolterm: III

(2.16)

Gleichung (2.16) gibt die Multipolentwicklung und die entsprechenden Abkürzungen wie sie in PEPC-B realisiert sind wieder.

Der Grund, warum man um  $\vec{r} = 0$  und nicht um  $\vec{x}' = 0$  entwickelt, ist der, dass man nicht garantieren kann, dass x' für alle Pseudoteilchen ein geeigneter Kleinheitsparameter ist. Jedoch kann der Entwicklungsabstand r vom jeweiligen Ladungsschwerpunkt (beachte dazu die Diskussion zum Öffnungskriterium (2.2)) als universeller Kleinheitsparameter, angesehen werden.

### 2.2.5.1 Hochreichen der Multipolmomente

Aus offensichtlichen, rechentechnischen Gründen, verzichtet man in Tree-Codes darauf, die Multipolentwicklung für jeden Baumknoten gesondert zu berechnen [29]. Um dies zu umgehen, reicht jede gitterfreie Methode die Multipole niedrigerer Baumlevel zum nächst höheren

Level durch. Um explizit zu illustrieren, wie dies in PEPC-B geschieht und um eine einheitliche Darstellung für die weitere Arbeit zu erlangen, seien  $b \leq 2^3$  Unterboxen mit den Ladungsschwerpunkten  $\vec{R}^{(k)}$ ; k = 1, ..., b gegeben, die zu einer neuen Box mit dem Schwerpunkt  $\vec{R}^{(n)}$ vereinigt werden sollen (siehe Skizze (2.10)). Enthalten die Unterboxen jeweils  $n_k$  Ladungen, so setzt sich die neue Box aus insgesamt

$$N = \sum_{k=1}^{b} \sum_{m_k=1}^{n_k} 1 \tag{2.17}$$

Teilchen zusammen.



**Abbildung 2.10:** Zwei Unterboxen mit Ladungsschwerpunkten  $\vec{R}^{(1)}$  und  $\vec{R}^{(2)}$  die zu einer gemeinsamen Box mit Schwerpunkt  $\vec{R}^{(n)}$  vereinigt werden

Zuerst liest man an Abbildung (2.10) folgende, wichtige Vektorrelation ab. Für den Relativvektor  $\vec{r}'^{(l)}$  einer Ladung bezüglich des neuen Ladungsschwerpunktes  $\vec{R}^{(n)}$  gilt

$$\vec{r}^{\prime(l)} = \vec{r}^{(m_k)} - \left(\vec{R}^{(n)} - \vec{R}^{(k)}\right)$$
  
:=  $\vec{r}^{(m_k)} - \vec{s}^{(k)}$  (2.18)

Mit den Bezeichnungen aus Gleichung (2.16) entstehen die einzelnen Terme aus Gleichung (2.15) für die neue Box wie folgt aus denen der Unterboxen:

### 1. Monopolterm:

$$I^{(n)} \stackrel{(2.16)}{=} M(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot Q^{(n)} \stackrel{(2.15)}{=} M(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot \sum_{l=1}^{N} q^{(l)} = M(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \sum_{k=1}^{b} \sum_{m_{k}=1}^{n_{k}} q^{(m_{k})}$$
$$= M(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot \sum_{k=1}^{b} Q^{(k)}$$
(2.19)

 $\rightarrow$  Das heißt, der Monopolterm transformiert sich auf triviale Weise und ergibt sich einfach aus der Summe der Gesamtladungen der Unterboxen.

$$\stackrel{(2.19)}{\Longrightarrow} Q^{(n)} = \sum_{k=1}^{b} Q^{(k)}$$
(2.20)

2. Dipolterm:

$$\Pi^{(n)} \stackrel{(2.16)}{=} \sum_{i=1}^{3} D_{i}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot P_{i}^{(n)} \stackrel{(2.15)}{=} \sum_{i=1}^{3} D_{i}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot \sum_{l=1}^{N} q^{(l)} \cdot r_{i}^{\prime(l)}$$

$$\stackrel{(2.18)}{=} \sum_{i=1}^{3} D_{i}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot \sum_{k=1}^{b} \sum_{m_{k}=1}^{n_{k}} q^{(m_{k})} \cdot \left(r_{i}^{(m_{k})} - s_{i}^{(k)}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{3} D_{i}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot \sum_{k=1}^{b} \left[P_{i}^{(k)} - Q^{(k)}s_{i}^{(k)}\right]$$
(2.21)

$$\stackrel{(2.21)}{\Longrightarrow} P_i^{(n)} = \sum_{k=1}^b \left[ P_i^{(k)} - Q^{(k)} s_i^{(k)} \right]$$
(2.22)

3. Quadrupolterm:

$$\begin{aligned} \text{III}^{(n)} &\stackrel{(2.16)}{=} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot T_{ij}^{(n)} \stackrel{(2.15)}{=} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot \sum_{l=1}^{N} q^{(l)} \cdot r_{i}^{\prime(l)} r_{j}^{\prime(l)} \\ \stackrel{(2.18)}{=} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \cdot \sum_{k=1}^{b} \sum_{m_{k}=1}^{n_{k}} q^{(m_{k})} \cdot \left(r_{i}^{(m_{k})} - s_{i}^{(k)}\right) \left(r_{j}^{(m_{k})} - s_{j}^{(k)}\right) \\ &= \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}(\vec{x}, \vec{R}^{(n)}) \sum_{k=1}^{b} \left[T_{ij}^{(k)} - P_{i}^{(k)} s_{j}^{(k)} - P_{j}^{(k)} s_{i}^{(k)} + q^{(k)} s_{i}^{(k)} s_{j}^{(k)}\right] (2.23) \end{aligned}$$

Also für den Quadrupol

$$\stackrel{(2.23)}{\Longrightarrow} T_{ij}^{(n)} = \sum_{k=1}^{b} \left[ T_{ij}^{(k)} - P_i^{(k)} s_j^{(k)} - P_j^{(k)} s_i^{(k)} + q^{(k)} s_i^{(k)} s_j^{(k)} \right]$$
(2.24)

Mit den Gleichungen (2.20), (2.22) und (2.24) stehen nun die Transformationsgleichungen fest, mit dessen Hilfe PEPC-B die Multipolmomente höherer Knoten aus denen der darunterliegenden Ebene berechnet. Zur besseren Lesbarkeit, sei hier noch abschließend erwähnt, dass in PEPC-B als auch in der begleitenden Literatur [29]  $\vec{R}^{(k)}$  als  $\vec{x}_{shift}^{(k)}$  bezeichnet wird.
#### 2.2.5.2 Multipolentwicklung der Blätter

Für die Baumblätter, die nur aus einzelnen Teilchen und damit Monopolen bestehen, gilt offensichtlich  $\vec{r} = 0$ . Damit folgt aus Gleichung (2.13), dass sowohl der Dipol- als auch der Quadrupolterm verschwinden. Für den Code hätte dies zur Folge, dass schon auf dem untersten Baumlevel die entsprechenden Momente verschwenden, welche er zur nächst höheren Ebene durchreichen könnte. Das im letzten Paragraphen diskutierte Transformationsschema wäre dadurch nicht anwendbar. Um dies zu vermeiden, wird für die Blätter ein anderer Entwicklungsansatz gewählt. Die Multipole eines Blattes erhält man durch eine Entwicklung von (2.10) um  $\vec{x}' = 0$ . Setzt man schlussendlich noch die triviale Ladungsverteilung eines Blattes  $\rho_{el}^{(B)}(\vec{x}') = q^{(B)} \cdot \delta(\vec{x}' - \vec{x}^{(B)})$  an der Stelle  $\vec{x}^{(B)}$  ein, so erhält man analog zu Gleichung (2.13)

$$\phi(\vec{x}) = f \left( \underbrace{\frac{1}{\sqrt{|\vec{x}|^2 + \epsilon^2}}}_{:=M^{(B)}(\vec{x})} \cdot \underbrace{\frac{q^{(B)}}{q^{(B)}}}_{:=Q^{(B)}} + \sum_{i=1}^{3} \underbrace{\frac{x_i}{(|\vec{x}|^2 + \epsilon^2)^{3/2}}}_{:=D_i^{(B)}(\vec{x})} \cdot \underbrace{\frac{q^{(B)} x_i^{(B)}}_{:=P_i^{(B)}}}_{:=P_i^{(B)}} + \sum_{i,j=1}^{3} \underbrace{\frac{1}{2} \left( \frac{3 \cdot x_i x_j}{(|\vec{x}|^2 + \epsilon^2)^{5/2}} - \frac{\delta_{ij}}{(|\vec{x}|^2 + \epsilon^2)^{3/2}} \right)}_{:=C_{ij}^{(B)}(\vec{x})} \cdot \underbrace{\frac{q^{(B)} x_i^{(B)} x_j^{(B)}}_{:=T_{ij}^{(B)}}}_{:=T_{ij}^{(B)}} \right)$$
(2.25)

Auf diese Weise erhält man die benötigten Terme  $Q^{(B)}$ ,  $P_i^{(B)}$  und  $T_{ij}^{(B)}$  die sich, mittels denen im letzten Abschnitt hergeleiteten Transformationsvorschriften (2.20), (2.22) sowie (2.24) nach oben durchreichen lassen. Der hierfür benötigte Vektor  $\vec{s}^{(k)}$  gemäß Definition (2.18) wird auf dem Blattlevel mit  $\vec{R}^{(k)} = \vec{x}_{shift}^{(k)} = 0$  definiert.

#### 2.2.6 Parallele Tree-Codes

Da Tree-Codes keine Rechengitter bemühen, also das Simulationsgebiet nicht deterministisch a priori gegliedert wird, steht man vor der Aufgabe, für einen parallelen Algorithmus Teilchenpositionen auf die einzelnen Prozessoren zu verteilen. Da die endliche, abzählbare Menge  $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^3$ der Teilchenpositionen als Untermenge des  $\mathbb{R}^3$  nicht anordbar ist, muss man sie zunächst bijektiv mittels einer Kurve  $\varphi$  auf  $\mathcal{K} \subset \mathbb{N}$  abbilden

$$\varphi: \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^3 \xrightarrow{1:1} \mathcal{K} \subset \mathbb{N}$$
(2.26)

Die so erhaltenen Werte  $k \in \mathcal{K}$ , genannt *Schlüssel*, können nun geordnet [43] und danach auf die Prozessoren verteilt werden.

In der Praxis [44] werden die gewonnen Schlüssel k noch durch eine *Hashfunktion* (*Streuwertfunktion*) auf Hashwerte abgebildet und entsprechend in einer Tabelle abgespeichert. Die Wahl der Kurve  $\varphi$  ist dabei von entscheidender Bedeutung. Wie im nächsten Abschnitt 2.2.6.1 gezeigt wird, leistet sie viel mehr als schlicht den Teilchenpositionen eineindeutig die Schlüssel k zuzuordnen.



**Abbildung 2.11:** Teilchen im  $\mathbb{R}^3$  geordnet einer Kurve  $\varphi$  folgend

#### 2.2.6.1 Z-Ordnen

Wie zuvor erwähnt, ist die Wahl der Kurve  $\varphi$  (2.26) entscheidend für die Parallelisierung des Tree-Codes. Im Falle von PEPC-B handelt es sich dabei um die von Warren und Salmon [44] vorgeschlagene *Morton*- oder *Z*-*Kurve*. Prinzipiell ist aber auch die Realisierung anderer, *raumfüllender* Kurven, wie etwa *Hilbertkurven*, möglich. In dem benannten Fall der Z-Kurve wird der Schlüssel *k* für ein Teilchen an der Position  $\vec{R} = (x, y, z)$  wie folgt berechnet [45]

$$k = p + \sum_{j=0}^{n_b - 1} 8^j \cdot \left( 4 \cdot \operatorname{Bit}(i_z, j) + 2 \cdot \operatorname{Bit}(i_y, j) + \operatorname{Bit}(i_x, j) \right)$$
(2.27)

Die Integer-Zahlen  $i_{x,y,z}$  werden dabei mittels

$$i_x = \text{DIV}\left(\frac{x}{s}\right); \ i_y = \text{DIV}\left(\frac{y}{s}\right); \ i_z = \text{DIV}\left(\frac{z}{s}\right)$$
 (2.28)

generiert. Hierfür wird die Kantenlänge

$$s := \frac{a}{2^{n_{lev}}} \tag{2.29}$$

der kleinsten Unterboxen aus der ursprünglichen Simulationsboxgröße a (vgl. Abb. (2.2) oder (A.1)) und der Anzahl der erfolgten Unterteilungen  $n_{lev}$  berechnet. Die Funktion Bit $(i_x, j)$  greift sich dann das jeweils j-te Bit der Binärdarstellung der Zahl  $i_x$  heraus.

Summe (2.27) stellt also fest, in welchem der  $2^{n_{lev}}$  1d Intervalle der Länge *s* der Vektor  $\vec{R}$  in der jeweiligen Koordinate, etwa *x*, liegt und setzt dann für jedes der insgesamt  $n_{lev}$  möglichen Auflösungslevel ein Bit-Tripel in der Reihenfolge  $i_z \rightarrow i_y \rightarrow i_x$  zusammen. Diese Tripel werden dann insgesamt zu einem  $n_b - 1$  langen Integer, dem Schlüssel *k*, zusammengefügt. Zum besseren Verständnis ist im Anhang A ein konkretes Beispiel einer Schlüsselberechnung ausgeführt.

Insgesamt hat die beschriebene Vorgehensweise zur Folge, dass auf einem 64 Bit Rechner zur Verschlüsselung einer Dimension DIV(64, 3) = 21 Bits also 20 mögliche Level zur Verfügung stehen (von 0 angefangen zu zählen). Zusätzlich wird noch ein sogenanntes *Platzhalterbit*  $p = 2^{63}$  hinzuaddiert, welches den Wurzelknoten kennzeichnet. Man erhält so die angestrebte, natürliche Ordnung (siehe auch die Durchnummerierung der Knoten in den Skizzen (2.2) und

(2.3)) für die Teilchen und kann die entstandene Z-Kurve an ausgewählten Stellen zerlegen und so die Teilchen auf die einzelnen Prozessoren verteilen.





Abbildung 2.12: Bsp. einer 2d Z-Kurve gleich- Abbildung 2.13: 3d Simulation mit Teilchendaverteilt auf vier Prozessoren (farbkodiert)

ten verteilt auf vier Prozessoren (farbkodiert)

Wie im Anhang A gezeigt, liegt ein weiterer Vorteil für die Nutzung einer Z-Kurve darin, dass der entstandene Integer Schlüssel k in seiner Binärdarstellung schon die komplette Baumstruktur beinhaltet. Ein Laufen durch den Baum, wie es die Potentialberechnung nötig macht, ist also durch reines Verschieben der Bits (Bit-Shift-Operationen), und damit rechnerintern sehr schnell zu realisieren.

In PEPC-B erfolgt das Berechnen der Schlüssel sowie das Ordnen derselbigen in der Routine tree\_domains. Das Zuteilen der Teilchen auf die Prozessoren muss dabei nicht zwangsweise gleichverteilt geschehen. Aufgrund der zuvor erläuterten prinzipiellen Arbeitsweise von Tree-Codes ist klar, dass der Rechenaufwand für unterschiedliche Teilchen völlig verschieden ausfallen kann. So wird beispielsweise ein Teilchen, das sich im dichten Hauptfeld eines Schwarms befindet, wesentlich mehr Arbeitsaufwand beim Aufbau des Baumes einfordern, da das Rechengebiet hier häufiger unterteilt werden muss bis das Teilchen in einer Blatt-Box isoliert ist. Ebenso ist die Potentialberechnung für besagtes Teilchen aufwändiger, da es mit vielen Teilchen in Nahfeldwechselwirkung tritt. Der Baum muss also häufig bis zum untersten Level aufgelöst werden. Völlig anders wird es sich mit einem Teilchen verhalten, dass sich etwa weit separiert vom Hauptschwarm befindet. Es wird schon durch wenige Gebietsunterteilungen in einer Blatt-Box zu isolieren sein und auch das Öffnungskriterium wird meist nur Monopol-Multipol-Wechselwirkungen fordern. Um nun den Fall abzufangen, dass nahezu alle "arbeitsintensiven" Teilchen einem Prozessor zugeteilt werden, während die Anderen fast ausschließlich mit schnell zu berechnenden Wechselwirkungen verbleiben, wird in PEPC-B meist gewichtet sortiert. Das bedeutet, dass die Aufteilung der Teilchen auf die Prozessoren von einem weiteren, an die Teilchen geknüpften Parameter work abhängig gemacht werden kann. Dieses work ist dann ein Maß dafür, wie aufwändig die Potentialberechnung für ein Teilchen im vorangegangenen Zeitschritt war. Das gewichtete oder balancierte Sortieren übernimmt in PEPC-B die Routine pbalsort [43].

An dieser Stelle muss nun noch eine wichtige Bemerkung im Kontext der Code-Entwicklung eingefügt werden. Im Verlauf dieser Arbeit kristallisierte sich die Notwendigkeit heraus, Teilchen während des Laufs aus einer Simulation herauszunehmen oder neue Teilchen an neuen Positionen hinzuzufügen (Abschnitt 4.2). Ein solcher Vorgang stellt einen signifikanten Eingriff in die Buchhaltung des Codes dar und war in der ursprünglichen Version von PEPC-B noch nicht implementiert. Um diese Lücke zu schließen, wurde die Prozedur **puff\_rate** entwickelt, die einen solchen Vorgang möglich macht. Es ist dabei wichtig, dass das Entfernen und das Hinzufügen vor der Berechnung der Schlüssel und dem Sortieren passiert. An dieser Stelle ist es möglich, die gesamte als auch die lokale Anzahl der Teilchen auf den einzelnen Prozessoren zu variieren. Nach dem Sortieren stehen diese beiden Parameter unumstößlich fest. Eine Abänderung würde also zu Fehlern im Programmverlauf führen.

#### 2.2.6.2 Nicht lokale Baumabschnitte

Nach welchen Kriterien der Baum aufgebaut beziehungsweise wie er schematisch zur Kraftberechnung durchlaufen wird, wurde bereits in den Abschnitten 2.2.1 und 2.2.2 eingängig beschrieben. Das Parallelisieren bringt nun diesbezüglich eine gewisse Schwierigkeit mit sich. Da das Verteilen der Teilchendaten auf die an der Rechnung beteiligten Prozessoren mittels des Zerlegen einer Kurve erfolgt, kann es vorkommen, dass der Baum unregelmäßig verteilt auf mehreren Prozessoren vorliegt (siehe Skizze (2.14)).



Abbildung 2.14: Aufteilung des Baumes aus Bsp. (2.2) auf 2 Prozessoren (farbkodiert)

Bei der Auswertung des Baumes gemäß Paragraph 2.2.2 kann es nun, bedingt durch das Öffnungskriterium, passieren, dass ein Prozessor für die Wechselwirkungsberechnung einen Teil des Baumes auflösen muss, welcher ihm nicht in Gänze lokal vorliegt. Des Weiteren werden für die Multipolentwicklung aus Abschnitt 2.2.5 eines Knoten auf einem höheren Level die Teilchendaten aus allen tieferen Kinder-Knoten benötigt. In beiden Fällen muss also mit anderen Prozessoren, auf denen die besagten Daten liegen, kommuniziert werden.

Um zu wissen, ab welchem Level abwärts der Baum komplett lokal vorliegt markiert jeder Prozessor eine spezielle Klasse von Zweigen. Diese sogenannten *"Branches"* (Abb. (2.14)) eines Prozessors definieren die in der Baumhierachie höchsten Stellen unterhalb derer der Baum vollkommen auf dem entsprechenden Prozessor vorliegt.

## 2.2.7 Bewertung und Einordnung von Tree-Codes

Ein wichtiger Bestandteil dieser Arbeit ist es, die Nutzbarkeit von gitterfreien Methoden für die Fusionsforschung abzuwägen und zu bewerten. Dazu ist es von tragender Bedeutung, sie richtig einordnen zu können und um ihre Stärken und Schwächen zu wissen. Dieser letzte Abschnitt soll nun diesbezüglich einen allgemeinen Überblick vermitteln. Hierfür werden gitterfreie Methoden im Allgemeinen und Tree-Codes im Speziellen der in der Plasmaphysik wohl am weitesten verbreiteten, vergleichbaren Algorithmusklasse vergleichbarer, der PIC-Methode [26], gegenübergestellt.

Als erstes ist zu konstatieren, dass PIC-Codes schon seit einigen Jahrzehnten sehr erfolgreich in der Plasmaphysik eingesetzt werden. Allein schon aus diesem Grund sind sie in ihrer Gänze ausgereifter und kompletter als ihre gitterfreien Pedants. Beispielsweise lösen die allermeisten von ihnen schon heute den kompletten Satz der Maxwell-Gleichungen. Sie sind daher nicht nur auf elektrostatische Probleme beschränkt. Obwohl es für Tree-Codes Ansätze gibt, diese Lücke zu schließen [45], sind diesbezügliche Ideen bis heute noch nicht völlig umgesetzt und einsatzbereit. Auch lassen sich Randbedingungen recht klar und einfach in PIC-Codes einbinden [1]. Hier liegt immer noch eine Schwäche von gitterfreien Methoden, die zum Teil mit dieser Arbeit behoben werden soll (Kapitel 4 und 5). Gerade letzterer Mangel erschwert eine Anwendung in der Plasmarandschicht erheblich. Viele der eben benannten Nachteile gehen auf das inhärente Naturell der Prozedur, die ohne ein abstraktes Rechengitter auskommt, zurück. Verzichtet man auf eine a priori Aufteilung des Rechengebietes, hat man auch keine festen Punkte, auf denen man Maxwell-Gleichungen diskretisieren und dann, gegebenenfalls mit Randbedingungen, lösen könnte.

Doch birgt das Weglassen von Gittern auch eine Fülle an Vorteilen. Zum Einen zeigt ein erster direkter Vergleich eines rudimentären Tree-Codes mit einem PIC-Programm, wie er von Matyash et al. [46] (dort Abb. 2) durchgeführt wurde, dass die räumliche Auflösung von PIC-Codes extrem verfeinert werden muss, um an die von Tree-Codes heranzureichen. Zum Anderen teilen Tree-Codes das Rechengebiet in jedem Schritt optimal auf. Das heißt, die Wurzelbox (schwarze Box in Abb. (2.2)) wird stets so gewählt, dass nur der Teil des Simulationsgebietes berücksichtigt wird, in dem sich auch wirklich Teilchen befinden. Dieser Vorteil gewährleistet eine stets hohe Teilchenauflösung. Aus diesem Grund sind Tree-Codes einfacher auf volle Dimensionalität (3d3v) zu erweitern. Weiterhin entfällt mit dem Gitter die Notwendigkeit, Teilcheneigenschaften wie etwa Ladungen mittels teils schwer auszuwertenden *Shape-Funktionen* auf abstrakte Punkte zu projizieren. Dies bedeutet einen enormen Gewinn an Rechenzeit gerade im Falle von 3d Simulationen.

Auch erschließt die hier vorgestellte Algorithmusklasse einen weiten Anwendungsbereich für die Fusionsforschung im Bereich komplizierter Geometrien. Komplexe Simulationsgebiete, wie etwa die Divertorregion in TOKAMAKs, wie ITER oder Randbereiche von Stellaratoren wie Wendelstein 7X, müssen nicht erst mit einem aufwendigen Rechengitter hinterlegt werden.

Durch den Wegfall dieser Beschränkungen sind Tree-Codes sehr flexibel und unkompliziert in der Anwendung.

Doch der wohl größte Vorteil liegt darin, dass das selbstkonsistente Potential direkt an der Teilchenposition und nicht auf einem Gitterpunkt berechnet wird. Dadurch wird gewährleistet, dass Nahfeldwechselwirkungen, wie beispielsweise Coulomb-Stöße, intrinsisch in der Prozedur berücksichtigt werden [26]. Hierfür muss in PIC-Codes ein extra, nach der eigentlichen PIC-Prozedur, anlaufender Programmteil implementiert werden, um die Stöße a posteriori zur Teilchendynamik hinzuzurechnen. Diese sogenannten *binären Stoßmodelle (Binary Collision Models)* [47] können den PIC-Code deshalb stark verlangsamen [48].

Im Zusammenspiel von Stößigkeit, Geometrieunabhängigkeit und inhärenten 3d Aufbau könnte Tree-Codes gerade im Bereich der Simulation der *Abschälschicht (Scrape Of Layer (SOL))* eine gesteigerte Bedeutung zukommen.

Beispielsweise ist es hier ein Trend in der Fusionsforschung die Randschicht künstlich zu stochastisieren. Dies geschieht etwa mittels eines "Dynamic Ergodic Divertors" (DED) [49, 50] oder anders geschaffenen *resonanten Störfeldern* (Resonant Magnetic Perturbations (RMP)). Man versucht damit unter Anderem schwerwiegende Instabilitäten (Edge Localized Modes (ELMs) [51]) zu unterdrücken. Mit diesen neuen Feldern bringt man aber unausweichlich 3d Phänomene in die Plasmarandschicht. Effekte wie etwa der Plasmatransport durch kurze Verbindungskanäle (*Short Fluxtubes*) [52] sind bis heute nicht voll verstanden. Gerade bei Divertor-TOKAMAKS sind die entstehenden Strukturen sehr klein (~ 1 mm) und dazu noch aufgrund der lokalen Dichte und Temperatur experimentell schwer aufzulösen. Sie wären deshalb sicher ein lohnendes Ziel für vollkinetische Simulationen. Jedoch reichen dafür die verfügbaren 1d oder 2d SOL-PIC Modelle offensichtlich nicht aus.

Auch Simulationsansätze im Bereich der Multiskalentheorien könnten von gitterfreien Simulationsmethoden profitieren. Eine Idee dieser Schiene in der Codeentwicklung ist es etwa, Teilchengruppierungen, die zunächst mit gröberen Mechanismen, etwa Fluidtheorien, behandelt wurden, wenn erforderlich, aufzulösen und vollkinetisch zu behandeln. Eine solche Verfeinerung während der Simulation oder gar nur mit Teilen der Simulationsteilchen ist mit einer gitterfreien Doktrin wesentlich leichter zu realisieren als mit gitterbasierten Ansätzen.

## 2.2.8 Schematischer Ablauf von PEPC-B vor der Arbeit

Zum Abschluss des vorliegenden Kapitels soll ein rudimentärer Überblick über den algorithmischen Ablauf von PEPC-B, mit und ohne die im Zuge dieser Arbeit neu eingebauten Erweiterungen, gegeben werden. Dazu wird zunächst ein Flussdiagramm (2.15) gezeigt, welches stichpunktartig die in den vorangegangenen Paragraphen erklärten Arbeitsschritte enthält. Genauer aufgeschlüsselt werden diese nochmals in Abschnitt (2.2.9) erläutert. Um den Entwicklungsstand nach der Arbeit zu verdeutlichen, wird das bereits gezeigte Flussdiagramm erweitert (2.16), wobei besonderen Wert darauf gelegt wird, die neu erarbeiteten Module deutlich zu kennzeichnen.

## 2.2.9 Schematischer Ablauf von PEPC-B nach der Arbeit

Bevor dazu übergegangen wird, die für diese Arbeit wichtigen neu eingefügte Module in PEPC-B detailliert zu erläutern, soll an dieser Stelle zunächst ein Überblick über den Entwicklungsstand ohne die erarbeiteten Neuerungen und Fähigkeiten gegeben werden (Flussdiagramm (2.15)). Weiter wird in der nachstehenden Auflistung genau aufgeschlüsselt wo welche Arbeitsschritte passieren. Die speziell rot hervorgehoben Prozeduren sind dabei diejenigen, welche im Rahmen der vorliegenden Arbeit neu entwickelt oder erweitert wurden (vgl. auch Flussdiagramm (2.16)). Von diesen werden nur solche in den folgenden Abschnitten erläutert, welche im Rahmen dieser Dokumentation Anwendung (siehe Kapitel (4) und (5)) fanden. Andere, wie etwa



Abbildung 2.15: Flussdiagramm für den Ablauf von PEPC-B ohne die in dieser Arbeit eingebauten Neuerungen

die Routine **mesh** oder **backgr\_scatter** werden später, gesondert publiziert oder sind dies schon [45].

I. Bevor das Programm gestartet wird, werden in der Eingabedatei *run.h*, oder einer äquivalenten Datei, welche dann auf run.h kopiert wird, die Grundeinstellungen für das Programm festgelegt. Dazu gehören unter Anderem physikalische Einstellungen wie Temperaturen von Teilchenverteilungen oder Zeitschrittweite des Integrators als auch mehr algorithmusrelevante Konfigurationen wie etwa ob gewichtet oder ungewichtet sortiert werden soll oder die Größe des vorzuhaltenden Speichers für die vom Code benutzten

Felder. Weitere wichtige Größen, welche explizit hier festgelegt werden können, sind *force\_const* sowie der Plummer-Parameter  $\varepsilon$  (2.10). Durch force\_const wird das Einheitensystem festgelegt, in dem PEPC-B operiert. Sie entspricht damit der Konstante f aus Gleichung (2.1) oder (2.10).

- II. Bevor der eigentliche Programmlauf beginnt setzt PEPC-B die in run.h getroffenen Voreinstellungen um. Das heißt im Wesentlichen, dass die Felder für den Baum und den Teilchendaten in den vordefinierten Größen alloziert werden. Dies geschieht in den Routinen setup, setup\_treearrays und pepc\_setup.
- III. Nachdem der technische Hintergrund steht, wird die zu simulierende Physik initialisiert. Dies übernimmt die neue Prozedur tokamak\_setup. Als wichtigster Teil wird hier das Simulationsgebiet eingestellt und die Simulationsteilchen generiert. Zusätzlich kann man wichtige Diagnosepunkte, sogenannte *Sondenteilchen*, festlegen. Außerdem werden an dieser Stelle die *Wandteilchen* (siehe Kapitel 4) entsprechend dem Simualtionsaufbau eingeführt.
- IV. Wenn sowohl die technischen als auch die physikalischen Rahmenbedingungen stehen, beginnt das eigentliche Herzstück des Programms, die Berechnung des selbstkonsistenten Feldes. Dies bedeutet namentlich, dass die Prozedur pepc\_fields\_p vom Hauptprogramm PEPCB aufgerufen wird. In dieser laufen dann die beschriebenen Schritte wie folgt aufgeschlüsselt ab.
  - 1. Zunächst wird tree\_domains gestartet:
    - i. Herausnehmen der im letzten Zeitschritt entsprechend markierten Teilchen aus der Simulation (siehe **tokamak\_eval**).
    - ii. Generieren von neuen Teilchen etwa einer physikalisch vorgegebenen Quelle folgend. Dies übernimmt die neu entwickelte Routine **puff\_rate**.
    - iii. Schlüsselberechnung gemäß Gleichung (2.27).
    - iv. Je nach Einstellung gewichtetes oder ungewichtetes Sortieren der Schlüssel mittels **pbalsort**.
  - 2. Danach werden in **tree\_build** die lokalen Baumstrukturen der einzelnen Prozessoren aufgebaut. Das heißt, es werden die lokalen Kinderknoten mit den gemeinsamen Elternknoten verknüpft.
  - 3. **tree\_branches** identifiziert die Branches jedes Prozessors und kommuniziert diese zu allen anderen Prozessoren.
  - 4. In tree\_fill wird dann mittels der Branches der globale Baum aufgebaut.
  - 5. Danach bestückt **tree\_properties** die einzelnen Knoten mit den zugehörigen physikalischen Eigenschaften wie Multipole, Gesamtladung oder Lage des Ladungsschwerpunktes.
  - 6. Mit **tree\_walk** startet die eigentliche Wechselwirkungsberechnung. Hier werden die sogenannten *Interaktionslisten* erstellt (siehe Paragraph 2.2.2).

- 7. **sum\_force** summiert dann letztendlich die einzelnen Multipolanteile zu den Gesamtwechselwirkungen auf.
- V. Nachdem die elektrostatischen Felder berechnet wurden, werden die eventuell zu berücksichtigenden, externen magnetische Felder den Teilchenpositionen zugeordnet. Für diese Aufgabe wurde speziell für Anwendungen in der Fusionsforschung die neue Routine **mesh** geschaffen. Diese ermöglicht es den Teilchen Gleichgewichtsfelder aus Fusionsanlagen zuzuordnen.
- VI. Stehen alle Felder fest, berechnet der Integrator eingebettet in integrator die neuen Geschwindigkeiten der Teilchen. In diesem Kontext wurde auch die neue Möglichkeit der Führungszentrumsintegration (*Guidingcentre Integration*) (siehe Paragraph 3.4.2) geschaffen. Bevor dann die Bewegung der Teilchen erfolgt (push) können die Teilchengeschwindigkeiten noch entsprechend der Reibung mit einem Plasma- oder Neutralgashintergrund modifiziert werden. Dafür wurde die neue Routine backgr\_scatter entwickelt.
- VII. Abschließend wurde noch die spezielle, neu geschriebene Diagnoseroutine tokamak\_eval angehängt. Neben dem Auslesen physikalischer Daten, wie beispielsweise Felder oder Geschwindigkeitsstatistiken, werden hier auch Teilchen markiert, die im nächsten Zeitschritt vor der nächsten Kraftberechnung aus dem Programm entfernt werden sollen.
- VIII. Schritte IV.-VII. werden nun so lange wiederholt, bis die vorgegebene Anzahl an Zeitschritten abgearbeitet ist.

Zur Erhöhung der Lesbarkeit und um einen direkten Abgleich mit dem Stand vor der Arbeit, etwa anhand von Darstellung (2.15) zu ermöglichen, ist an dieser Stelle nochmal ein erweitertes Flussdiagramm eingefügt (2.16).



Abbildung 2.16: Flussdiagramm für den Ablauf von PEPC-B mit den in dieser Arbeit eingebauten Neuerungen (rot hinterlegt). Die Nummerierung entspricht der obigen Auflistung

# Kapitel 3

# Das Leap-Frog-Schema

Baumalgorithmen, wie das in dieser Arbeit beschriebene Programm PEPC-B, lassen sich ohne größere Umstände zur Simulation der vollständigen Dynamik von geladenen Teilchen heranziehen. Dazu muss natürlich ein geeignetes numerisches Verfahren zur Lösung der Bewegungsgleichung implementiert und zur Anwendung gebracht werden.

In PEPC-B ist dies der sogenannte *Leap-Frog (Bocksprung)*-Algorithmus. Dieses Integrationsschema findet in zahlreichen Disziplinen der numerischen Mathematik Verwendung. Ebenso zahlreich wie seine Anwendungen sind wohl seine Namen [53]. Man kennt es unter *Störmer-Verfahren, Verlet-Verfahren* oder eben *Leap-Frog-Schema*. Da letztere Bezeichnung in der Plasmaphysik die gebräuchlichste ist, soll sie auch hier weiter verwendet werden.

Man kann wohl behaupten, dass das Leap-Frog-Schema das Standard-Integrationsschema für kinetische Simulationen in der Plasmaphysik ist. Wie etwa in [26] diskutiert wird, gibt es dafür zwei simple Gründe. Zum Einen ist es einfach zu realisieren, zum Anderen lässt es sich als explizites Einschrittverfahren formulieren und ist damit schnell und speichereffizient. Für parallele Tree-Codes hat die Nutzung eines Einschrittverfahrens noch einen weiteren wichtigen Vorteil. Ein Mehrschrittverfahren fordert naturgemäß einen höheren Anteil an Teilchendaten: So müssten Daten aus vorangegangenen Zeitschritten für alle Teilchen gespeichert werden. Da aber, wie im letzten Abschnitt 2.1 beschrieben, in Tree-Codes die Teilchendaten und nicht das Simulationsgebiet auf die Prozessoren verteilt werden, müssten diese Daten, falls erforderlich, auch auf andere Prozessoren verschoben werden. Dieser erhebliche Mehraufwand an Kommunikation könnte den Programmverlauf stark verlangsamen.

Aufgrund seiner Bedeutung für die in dieser Arbeit behandelte Klasse von Simulationstechniken und der anstehenden Erweiterung zu einem neuen Führungszentrumsintegrator (Paragraph 3.4.1) soll das Prinzip hier etwas genauer beleuchtet werden.

Ausgangspunkt der Betrachtungen ist ein Anfangs-Wert-Problem (AWP) [54] zweiter Ordnung

$$y'' = f(t, y, y'); y'(t_0) = v_0, \ y(t_0) = r_0$$
(3.1)

Beim originalen Leap-Frog-Schema geht man von der Vereinfachung

$$f(t, y, y') = f(t, y)$$
 (3.2)

aus. Man nimmt also an, dass die rechte Seite nicht von y' abhängt. Diese Voraussetzung führt im Wesentlichen dazu, dass das resultierende, numerische Lösungsverfahren explizit formuliert werden kann. Als physikalisches Beispiel kann man sich etwa die Newton-Gleichung für eine rein elektrostatische Fragestellung vorstellen

$$\ddot{\vec{r}} = \frac{q}{m} \cdot \vec{E}(\vec{r}) \; ; \dot{\vec{r}}(t_0) = \vec{v}_0, \; \vec{r}(t_0) = \vec{r}_0 \tag{3.3}$$

Mathematisch kann man einen Ausdruck wie (3.1) wieder auf ein System erster Ordnung zurückführen [54]. Damit vereinfacht sich (3.1) zu dem AWP

$$\dot{\vec{z}} = \begin{pmatrix} \dot{\vec{r}} \\ \dot{\vec{v}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{v} \\ \vec{f}(t,r) \end{pmatrix} ; \begin{pmatrix} \vec{r}(t_0) \\ \vec{v}(t_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{r}_0 \\ \vec{v}_0 \end{pmatrix}$$
(3.4)

Die prinzipielle Idee des Leap-Frog-Algorithmus ist es nun, in den Komponenten  $\vec{r}$  und  $\vec{v}$  jeweils ein separates Euler-Verfahren [53] anzuwenden. Dabei werden die beiden Zeitschritte zu Beginn um einen halben Zeitschritt  $\Delta t/2$  gegeneinander versetzt und damit gekoppelt. Das Leap-Frog-Schema lässt sich demnach wie folgt darstellen

$$\vec{v}_{n+1/2} = \vec{v}_{n-1/2} + \Delta t \cdot \vec{f}(t, \vec{r}_n)$$
  
$$\vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + \Delta t \cdot \vec{v}_{n+1/2}$$
(3.5)

Skizziert man diese Vorgehensweise, wie in Abbildung (3.1) geschehen, anhand einer Zeitachse, so wird auch klar, warum diese Methode mit dem Namen Leap-Frog versehen wurde.



Abbildung 3.1: Schematischer Ablauf des Leap-Frog-Integrationsschemas. Der grüne Pfeil zeigt den speziellen, halben Zeitschritt zu Anfang um  $v_{1/2}$  zu erhalten an

Wie ein Laubfrosch scheinen die Ortskoordinate  $\vec{r}$  und die Geschwindigkeitskoordinate  $\vec{v}$  zeitlich immer übereinander hinwegzuspringen.

Für die meisten Probleme des Typs (3.4) sind als Anfangswerte nur  $\dot{\vec{z}}(t_0) = \dot{\vec{z}}_0$ ,  $\vec{z}(t_0) = \vec{z}_0$ , also  $\vec{r}_0$  und  $\vec{v}_0$ , bekannt. Aus diesem Grund muss man, um das Schema (3.5) anwenden zu können, im ersten Zeitschritt  $v_{1/2}$  berechnen. Dazu bedient kann man sich eines anderen Integrationsverfahrens. Weitverbreitet ist die Methode, sich an dieser Stelle auf eine einzige Anwendung des Euler-Verfahrens [53] in der Geschwindigkeitskomponente mit Schrittweite  $\Delta t/2$ zurückzuziehen. Dies ist in Skizze (3.1) durch den grünen Pfeil verdeutlicht.

Wie in [55] nachgerechnet wird, ist das Euler-Verfahren ein Verfahren mit Konsistenzordnung

1 (Definition siehe Anhang (B.14)). Dem Gegenüber steht das, in diesem Sinne bessere Leap-Frog-Schema der Konsistenzordnung 2. Der Vorteil, den der Leap-Frog-Algorithmus gegenüber dem expliziten Euler-Verfahren hat, liegt aber nicht nur in einer verbesserten Konsistenz (siehe Anhang (B.13)). Vielmehr ist er dem expliziten Euler-Verfahren durch seine Symplektizität [53] überlegen. Damit konserviert er physikalische Erhaltungsgrößen besser als der originale Euler.

# 3.1 Das Boris-Lösungsschema

Soll ein Programm dazu verwendet werden, Plasmasimulationen speziell für die Fusionsforschung durchzuführen, so ist es unvermeidbar, magnetische Felder in die Simulationen und somit in die Bewegungsgleichungen der Teilchen mit einzuschließen. Das hat zur Folge, dass das System (3.4) in der zweiten Komponente die Lorentz-Kraft und damit die Geschwindigkeit beinhaltet. Daraus folgt nun aber, dass die Vereinfachung (3.2) in dieser Form nicht mehr gültig ist. Die erste Gleichung in (3.5) muss modifiziert werden.

$$\frac{\vec{v}_{n+1/2} - \vec{v}_{n-1/2}}{\Delta t} = \vec{f}(t, \vec{r}_n, \vec{v})$$
(3.6)

 $\vec{v}$  ist dabei eine beliebige Geschwindigkeitsabhängigkeit der Kraft. Es muss nun festgelegt werden, zu welchem Zeitpunkt der Geschwindigkeitswert genommen und für  $\vec{v}$  eingesetzt wird. Sicherlich ist es möglich,  $\vec{v} = \vec{v}_{n-1/2}$  zu setzen. Jedoch ist es Konvention [1],  $\vec{v}$  als Mittelwert über einen Zeitschritt zu nehmen

$$\vec{v} = \frac{\vec{v}_{n+1/2} + \vec{v}_{n-1/2}}{2} \tag{3.7}$$

Damit wird (3.6) zu

$$\frac{\vec{v}_{n+1/2} - \vec{v}_{n-1/2}}{\Delta t} = \vec{f}\left(t, \vec{r}_n, \frac{\vec{v}_{n+1/2} + \vec{v}_{n-1/2}}{2}\right)$$
(3.8)

Diese Vorgehensweise ändert nichts am eigentlichen Integrationsschema. Jedoch wird der Integrator zu einem impliziten Schema bezüglich  $v_{n+1/2}$ . Das Verfahren zur Bearbeitung hängt natürlich von der gegebenen Struktur des Problems ab. Wie bereits erwähnt, handelt es sich im vorliegenden Fall um das Lorentz-Kraftgesetz

$$\dot{\vec{v}} = \frac{q}{m} \left( \vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) \tag{3.9}$$

(3.8) spezialisiert sich demnach zu

$$\frac{\vec{v}_{n+1/2} - \vec{v}_{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m} \left( \vec{E} + \frac{\vec{v}_{n+1/2} + \vec{v}_{n-1/2}}{2} \times \vec{B} \right)$$
(3.10)

Hierbei sind sowohl  $\vec{E}$  als auch  $\vec{B}$  jeweils zum Zeitpunkt  $t_n$  (vgl. Abb. (3.1)) zu nehmen. Aus schreibökonomischen Gründen wird hier und im Folgenden jedoch darauf verzichtet, den Index n mitzuführen.

Der Algorithmus, welcher in der Plasmaphysik meist dazu verwendet wird, diese, nunmehr algebraischen Gleichungen bezüglich  $v_{n+1/2}$  aufzulösen, ist unter dem Namen *"Boris-Solver"* bekannt. In den folgenden Abschnitten soll nun die Theorie umrissen und die praktische Programmierung des Schemas erläutert werden. Dabei stützen sich die getroffenen Aussagen in weiten Teilen auf das Buch [1], welches die ursprüngliche Publikation [56] zusammenfasst.

#### **3.1.1** Theorie des Schemas

Ausgangspunkt der Entwicklung des Boris-Solver ist Gleichung (3.8)

$$\frac{\vec{v}_{n+1/2} - \vec{v}_{n-1/2}}{\Delta t} = f\left(t, \vec{r}_n, \frac{\vec{v}_{n+1/2} + \vec{v}_{n-1/2}}{2}\right)$$

Man substituiert nun

$$\vec{v}_{n-1/2} = \vec{v}_{-} - \frac{q\vec{E}}{m}\frac{\Delta t}{2}$$
 (3.11)

$$\vec{v}_{n+1/2} = \vec{v}_{+} + \frac{q\vec{E}}{m}\frac{\Delta t}{2}$$
 (3.12)

Dadurch erreicht man, dass sich die explizite  $\vec{E}$  Abhängigkeit in der Bewegungsgleichung aufhebt. Man gelangt zu

$$\frac{\vec{v}_{+} - \vec{v}_{-}}{\Delta t} = \frac{q}{2m} \left( \vec{v}_{+} + \vec{v}_{-} \right) \times \vec{B}$$
(3.13)

Um einen Zeitschritt von (n - 1/2) nach (n + 1/2) vollständig durchzuführen, muss der Ausdruck (3.13) nach  $\vec{v}_+$  aufgelöst werden. Dies wird die Aufgabe des Boris-Solvers sein. Um den dazu vorzunehmenden Ansatz zu verstehen, multipliziert man (3.13) skalar mit  $(\vec{v}_+ + \vec{v}_-)$  und erhält somit

$$\|\vec{v}_{+}\|^{2} = \|\vec{v}_{-}\|^{2} \tag{3.14}$$

Analog gelangt man durch Multiplikation mit  $\vec{B}$  zu

$$\langle \vec{v}_+, \vec{B} \rangle = \langle \vec{v}_-, \vec{B} \rangle \iff \vec{v}_+^{\parallel} = \vec{v}_-^{\parallel}$$
(3.15)

Wobei die zu  $\vec{B}$  parallele beziehungsweise senkrechte Richtung wie folgt definiert ist. Mit

$$\vec{B}_0 := \frac{\vec{B}}{\|\vec{B}\|}$$
 (3.16)

gilt

$$\vec{v}_{\pm}^{\parallel} := \vec{B}_0 \langle \vec{B}_0, \vec{v}_{\pm} \rangle \tag{3.17}$$

$$\vec{v}_{\pm}^{\perp} := \vec{v}_{\pm} - \vec{B}_0 \langle \vec{B}_0, \vec{v}_{\pm} \rangle$$
 (3.18)

Wobei  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  das Standard-Skalarprodukt ist.

Damit beweisen (3.14) und (3.15), dass die durch (3.13) festgelegte Transformation von  $\vec{v}_{-}$  auf  $\vec{v}_{+}$  eine Drehung (vgl. Abb. (3.3)) um die Achse  $\vec{B}$  sein muss. Sie verändert damit nur die Komponenten  $\vec{v}_{+}^{\perp}$  und  $\vec{v}_{-}^{\perp}$  senkrecht zu  $\vec{B}$ . Es genügt also, die Situation in der Ebene S senkrecht zu  $\vec{B}$  zu betrachten (siehe Abb. (3.2).



**Abbildung 3.2:** B-Feld in beliebiger Richtung und Vektoren  $\vec{v}_{\pm}$  coplanar in der Ebene C.  $\vec{v}_{\pm}^{\perp}$ in der Ebene S, senkrecht zu  $\vec{B}$ 

**Abbildung 3.3:** Veranschaulichung der Drehung von  $\vec{v}_{-}$  auf  $\vec{v}_{+}$  in der Ebene S senkrecht zu  $\vec{B}$  (vgl. [1])

Bevor die praktische Realisierung des Algorithmus besprochen wird (siehe Abschnitt 3.1.2), soll an dieser Stelle noch eine wichtige, erste numerische Bewertung des Algorithmus vorgezogen werden.

Zunächst folgt aus (3.18) und (3.15)

$$\vec{v}_{+} - \vec{v}_{-} = \vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp}$$
(3.19)

und damit aus Gleichung (3.13)

$$\frac{\vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp}}{\Delta t} = \frac{q}{m} \left( \frac{\vec{v}_{+}^{\perp} + \vec{v}_{-}^{\perp}}{2} \right) \times \vec{B}$$
(3.20)

Da der Einfluss des E-Feldes schon in  $\vec{v}_{\pm}$  enthalten ist, erwartet man, dass die Veränderung von  $v_{-}^{\perp}$  auf  $v_{+}^{\perp}$  einer Kreisbahn folgt (vgl. Zeichnung (3.4)). Dies würde der analytischen Lösung (mit einer zeitzentrierten Substitution analog (3.7)) der Lorentz-Bewegungsgleichung für ein Teilchen in einem homogenen Magnetfeld entsprechen.



Abbildung 3.4: Ausschnitt einer gleichförmige Bewegung eines Teilchens in einem homogenen Magnetfeld

Damit gilt, zusammen mit der Gyrationsfrequenz  $\omega_c$ , für die Änderung des Gyrationswinkels  $d\varphi$ 

$$d\varphi = \omega_c \, dt \tag{3.21}$$

Zusätzlich lässt sich anhand von Zeichnung (3.4) mittels der angedeuteten Winkelalgebra  $d\varphi = \Theta$  belegen. Somit ergibt sich

$$\Theta = \omega_c \, dt$$

und für den numerischen Fall eines endlichen Zeitschrittes  $\Delta t$ 

$$\Theta = \omega_c \cdot \Delta t = \frac{q B}{m} \cdot \Delta t \tag{3.22}$$

Zeichnung (3.3) entnimmt man nun

$$\tan\left(\frac{\Theta}{2}\right) = \frac{\|\vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp}\|}{\|\vec{v}_{+}^{\perp} + \vec{v}_{-}^{\perp}\|} \stackrel{(3.20)}{=} \frac{qB}{m} \cdot \frac{\Delta t}{2} = \frac{\omega_{c} \cdot \Delta t}{2}$$
(3.23)

Man erhält also

$$\Theta = 2 \cdot \arctan\left(\frac{qB}{m} \cdot \frac{\Delta t}{2}\right)$$
$$= \omega_c \cdot \Delta t \cdot \left(1 - \frac{(\omega_c \cdot \Delta t)^2}{12} \pm \ldots\right)$$
(3.24)

Aus dem Vergleich mit Gleichung (3.22) folgt, dass der Fehler des Verfahrens quadratisch mit der Schrittweite  $\Delta t$  des Integrators sinkt. Damit verschlechtert das Boris-Schema die Konsistenzordnung des Leap-Frog-Algorithmus nicht.

### 3.1.2 Praktische Realisierung

Im letzten Abschnitt wurde die Transformation von  $\vec{v}_{-}$  auf  $\vec{v}_{+}$  als Drehung um  $\vec{B}$  identifiziert. An dieser Stelle soll nun das eigentliche Rüstzeug bereitgestellt werden, um diese Erkenntnis für die Numerik ausnutzen zu können.

Dazu wird zunächst ein Hilfsvektor  $\vec{v}$  ' so konstruiert, dass

$$\vec{v}' \perp (\vec{v}_{+} - \vec{v}_{-}) \stackrel{(3.19)}{\Longleftrightarrow} \vec{v}' \perp (\vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp})$$
(3.25)

gilt. Dies geschieht über einen weiteren Vektor  $\vec{t}$  der über

$$\vec{v}' := \vec{v}_{-} + \vec{v}_{-} \times \vec{t} \stackrel{(3.18)}{\Longrightarrow} \vec{v}'^{\perp} = \vec{v}_{-}^{\perp} + \vec{v}_{-}^{\perp} \times \vec{t}$$
(3.26)

eingeführt wird. Es ist nun zu klären, wie  $\vec{t}$  zu wählen ist, so dass  $\vec{v}$  ' die Bedingung (3.25) erfüllt. Wählt man  $\vec{t} \parallel \vec{B}$ , so stellt sich die Situation in der Ebene S senkrecht zu  $\vec{B}$  wie in Skizze (3.5) abgebildet dar.

Aus (3.14) und (3.15) lässt sich schließen, dass  $\|\vec{v}_{-}^{\perp}\| = \|\vec{v}_{+}^{\perp}\|$  gilt. Somit folgt aus Zeichnung (3.5)

$$\tan\left(\frac{\Theta}{2}\right) = \frac{\|\vec{v}_{-}^{\perp} \times \vec{t}\,\|}{\|\vec{v}_{-}^{\perp}\|} = \frac{\|\vec{v}_{-}^{\perp}\|\,\|\vec{t}\,\|}{\|\vec{v}_{-}^{\perp}\|}$$
$$\Rightarrow \|\vec{t}\,\| = \tan\left(\frac{\Theta}{2}\right). \tag{3.27}$$

Also

$$\vec{t} := \vec{B}_0 \cdot \tan\left(\frac{\Theta}{2}\right) \stackrel{(3.23)}{=} \frac{q\vec{B}}{m} \cdot \frac{\Delta t}{2}$$
(3.28)



**Abbildung 3.5:** In der Ebene S senkrecht zu  $\vec{B}$  für die Drehung eingeführte Hilfsvektoren  $\vec{v}'$ ,  $\vec{t}$  (vgl. [1])

Hiermit ist gezeigt, dass wenn  $\vec{t}$  gemäß (3.28) gewählt wird, gilt

$$\vec{v}^{\,\prime\perp} \perp \left(\vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp}\right) \stackrel{(3.19)}{\longleftrightarrow} \vec{v}^{\,\prime\perp} \perp \left(\vec{v}_{+} - \vec{v}_{-}\right) \tag{3.29}$$

Und daraus folgt

$$0 = \langle \vec{v}'^{\perp}, \vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp} \rangle \stackrel{(3.18)}{=} \langle \vec{v}' - \vec{B}_{0} \langle \vec{B}_{0}, \vec{v}' \rangle, \vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp} \rangle$$

$$\stackrel{(3.18)}{=} \langle \vec{v}', \vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp} \rangle - \underbrace{\langle \vec{v}'^{\parallel}, \vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp} \rangle}_{=0} \stackrel{(3.19)}{=} \langle \vec{v}', \vec{v}_{+} - \vec{v}_{-} \rangle$$

$$\Leftrightarrow \vec{v}' \perp (\vec{v}_{+} - \vec{v}_{-}) \qquad (3.30)$$

Zusammen mit

$$(\vec{v}_{+} - \vec{v}_{-}) = (\vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp}) \perp \vec{B}$$
 (3.31)

folgert man

$$\exists \vec{s} \parallel \vec{B} : \vec{v}' \times \vec{s} = \vec{v}_{+} - \vec{v}_{-} \tag{3.32}$$

Abschließend ist noch der Betrag von  $\vec{s}$  zu bestimmen. Mit dem Ansatz

$$\vec{s} = \alpha \, \vec{t} \,; \alpha \in \mathbb{R} \tag{3.33}$$

berechnet man wie im Anhang B.2 gezeigt

$$\vec{s} = \frac{2}{1+t^2} \, \vec{t} \tag{3.34}$$

# 3.2 Algorithmischer Ablauf der Leap-Frog-Boris-Prozedur

Nun, da alle benötigten Schritte erläutert wurden, soll der schrittweise Verlauf des Leap-Frog-Boris-Schemas zusammengetragen werden.

- I. Addiere zu  $\vec{v}_{n-1/2}$  die erste Hälfte der Geschwindigkeitsänderung, hervorgerufen durch die elektrische Wechselwirkung  $\stackrel{(3.12)}{\Longrightarrow} \vec{v}_{-}$ .
- II. Führe die Drehung um den Drehwinkel  $\Theta$  bezüglich  $\vec{B}$  aus. Dazu werden nacheinander die folgenden Hilfsvektoren konstruiert
  - i)  $\vec{t} = \frac{q\vec{B}}{m}\frac{\Delta t}{2}$  (3.28) (*Beachte: q* ist vorzeichenbehaftet).
  - ii)  $\vec{v}' := \vec{v}_- + \vec{v}_- \times \vec{t}$  (3.26).
  - iii)  $\vec{s} = \frac{2}{1+t^2} \vec{t}$  (3.34).
  - iv)  $\vec{v}_+ = \vec{v}_- + \vec{v}' \times \vec{s}$  (3.32).
- III. Addiere die zweite Hälfte der elektrischen Geschwindigkeitsänderung zu  $\vec{v}_+ \stackrel{(3.12)}{\Longrightarrow} \vec{v}_{n+1/2}$ .

## 3.3 Numerische Stabilität

Wie alle numerischen Verfahren ist auch das Leap-Frog-Boris-Schema hinsichtlich seiner Genauigkeit begrenzt. Erwartungsgemäß, nimmt der auftretende Fehler mit der Größe des Zeitschrittes  $\Delta t$  zu. Genauer lässt sich zeigen ([26] Abschnitt 3.1), dass der Fehler mit  $(\Delta t)^2$ anwächst. In der Einführung zu dem vorliegenden Kapitel wurde bereits erwähnt, dass die Hauptbeweggründe für den Einsatz eines Einschrittverfahrens darin liegen, dass es schnell, einfach und explizit ist. Diesen Vorteil bezahlt man damit, dass der Größe der Zeitschrittweite  $\Delta t$  restriktive Grenzen gesetzt sind. Das heißt, für verlässliche Ergebnisse darf  $\Delta t$  nicht zu groß gewählt werden. Um ein Gefühl dafür zu bekommen, wie die Zeitschritte gewählt werden dürfen, sollen im Folgenden (Abschnitte 3.3.1 und 3.3.2) zwei Abschätzungen, angelehnt an [26], erfolgen.

Entscheidend für die Wahl der Zeitschrittweite sind die kürzesten Zeitskalen, vorgeben durch physikalische Prozesse, welche noch aufgelöst werden sollen. Anders ausgedrückt, muss man gewährleisten, dass ausreichend viele Zeitschritte während des kurzlebigsten Prozesses gemacht werden. In der Plasmaphysik tauchen zwei Kandidaten für einen solchen, periodischen Prozess auf:

1. Plasmaoszillationen auf der Zeitskala

$$\tau_p := \frac{1}{\omega_p} \tag{3.35}$$

Mit der Elektronen Plasmafrequenz 
$$\omega_p = \sqrt{rac{n \ e^2}{arepsilon_0 \ m_e}}$$

39

2. Gyrationsbewegung der Elektronen auf der Zeitskala

$$\tau_c := \frac{1}{\omega_c} \tag{3.36}$$

Mit der Elektronengyrationsfrequenz  $\omega_c = \frac{|e| B}{m_e}$ .

Welche Zeitskala,  $\tau_p$  oder  $\tau_c$ , die kürzere ist, hängt dabei hauptsächlich von der Plasmadichte n ab.



*Abbildung 3.6:* Vergleich von  $\tau_p$  (3.35) und  $\tau_c$  (3.36) aufgetragen über der Plasmadichte n bei B = 2 T

Abbildung (3.6) zeigt, dass für B = 2 T erst ab einer Plasmadichte von  $n \approx 4 \cdot 10^{19}$  m<sup>-3</sup> die Plasmafrequenz die niedrigere Schranke stellt. Zuvor ( $n < 4 \cdot 10^{19}$  m<sup>-3</sup>) ist die Zeitschrittweite durch die Elektronengyrationsfrequenz limitiert. Bezieht man sich auf Abbildung (1.3) in [7], so sieht man, dass diese Einschränkung durchaus für die Simulation von Fusionsexperimenten Gültigkeit besitzt. Es ist demnach erstrebenswert, die obere Beschränkung durch die Elektronengyration zu eliminieren. Ein entwickelter Weg hierfür soll deshalb in Abschnitt 3.4.1 beschrieben werden.

<u>Bemerkung</u>: Es ist noch zu erwähnen, dass strenggenommen noch eine zweite Gyrationszeit  $\tau_f$ zu untersuchen ist. Sie entspricht dem inversen der Gyrationsfrequenz von Teilchen mit  $m_f = 100 \cdot m_e$ . Dieser Vergleich ist deshalb wichtig, da in manchen Anwendungen die Ionenmasse auf kleinere Werte gesetzt wird. Damit erreicht man, dass das Verhältnis von Ionen- zu Elektronenmasse  $m_p/m_e$  abnimmt. Hiermit lassen sich langwierige Simulationen abkürzen, da die Bewegung der nun leichteren Ionen qualitativ gleich, jedoch auf kürzeren Zeitskalen verläuft. An dieser Stelle ist der Vergleich deshalb obligatorisch, um zu prüfen, ob man trotz Ausschalten der Beschränkung durch die Elektronengyrationsfrequenz, etwa durch einen Führungszentrumsintegrator (Abschnitt 3.4.1), nicht gleichzeitig eine weitere Gyrationsbeschränkung durch die nun leichteren Ionen betrachten muss. Jedoch gilt

$$\tau_f := \frac{100 \cdot m_e}{e_0 B} \stackrel{B=2 \text{ T}}{\approx} 28,43 \cdot 10^{-11} \text{s}$$
(3.37)

Ein Vergleich mit Abbildung (3.6) gibt Aufschluss darüber, dass die Ionengyrationsfrequenz selbst bei herunterskalierter Masse noch um Größenordnungen niedriger als  $\omega_p$  ist. Somit stellt sie nie eine relevante Einschränkung für die Zeitschrittweite dar.

#### 3.3.1 Plasmaoszillation

Um Plasmaoszillationen genauer zu untersuchen (siehe Paragraph 3.2 in [57]), betrachtet man eine entsprechende Schwingungsgleichung, etwa für die *r*-Koordinate

$$\frac{d^2}{dt^2}r(t) = -\omega_p^2 r(t) ; r(0) = a_0$$
(3.38)

Die analytische Lösung ist bekanntermaßen

$$r(t) = a_0 \exp\{-i\,\omega_p\,t\}$$
(3.39)

Wendet man das Leap-Frog-Schema aus Gleichung (3.8) an, das heißt, setzt man in das Gleichungssystem (3.5) die Prozessfunktion  $f(t, r_k) = -\omega_p^2 r_k$  ein, so gelangt man zu

$$\frac{r_{k+1} - 2r_k + r_{k-1}}{\Delta t^2} = -\omega_p^2 r_k \tag{3.40}$$

Geht man davon aus, dass die numerische Lösung  $r_k$  die gleiche Struktur, nur mit einer numerischen Frequenz  $\omega_{num}$ , hat

$$r_k = a_0 \exp\left\{-i\,\omega_{num}\,t_k\right\} \tag{3.41}$$

und setzt diese in (3.40) ein, so erhält man

$$\sin\left(\frac{\omega_{num}\,\Delta t}{2}\right) = \pm \frac{\omega_p\,\Delta t}{2} \iff \left|\frac{\omega_p\,\Delta t}{2}\right| = \left|\sin\left(\frac{\omega_{num}\,\Delta t}{2}\right)\right| \tag{3.42}$$

Ist  $\omega_{num} \in \mathbb{R}$  so ist der  $\sin\left(\frac{\omega_{num} \Delta t}{2}\right)$  durch 1 beschränkt und man kann abschätzen

$$\omega_p \,\Delta t \le 2 \tag{3.43}$$

In kinetischen Simulationen wird diese Bedingung aufgrund der vielen nötigen Zeitschritte  $N_t \sim 10^{4-7}$  verschärft [26] und man setzt

$$\omega_p \,\Delta t \leqq 0,2 \tag{3.44}$$

## 3.3.2 Gyrationsfrequenz

Um eine adäquate Fehlerabschätzung für die Gyrationsbewegung zu bekommen, bedient man sich Gleichung (3.24). Es folgt

$$\frac{\Theta}{\Delta t} = \omega_c \cdot \left( 1 - \frac{(\omega_c \cdot \Delta t)^2}{12} \pm \dots \right)$$
(3.45)

Ausdruck (3.45) liefert damit einen möglichen Ansatz, um die numerische Gyrationsfrequenz

$$\omega_{num} := \frac{\Theta}{\Delta t} \tag{3.46}$$

mit der physikalischen  $\omega_c$  zu vergleichen. Man erhält aus (3.45)

$$\frac{|\omega_{num} - \omega_c|}{\omega_c} \doteq \frac{(\omega_c \Delta t)^2}{12} \stackrel{!}{\leq} \delta \tag{3.47}$$

Wobei  $\delta$  ein vorgegebener Fehler ist. Fordert man etwa  $\delta = 1 \%$  (vgl. Paragraph 3.2 in [57]) so ergibt sich die Bedingung

$$\omega_c \Delta t \leqq 0,35 \tag{3.48}$$

Rückschlüsse auf die numerische Trajektorie, welche der Integrator für zu große Zeitschritte produziert, lassen sich wieder anhand von Gleichung (3.24) ziehen

$$\Theta = 2 \cdot \arctan\left(\frac{1}{2}\omega_c \,\Delta t\right) \tag{3.49}$$

An dieser Identität wird klar, dass für den Drehwinkel  $\Theta$  gilt:

$$\Theta \xrightarrow{(\omega_c \Delta t \to \infty)} \pi \tag{3.50}$$

Das heißt, das Teilchen oszilliert in einer Ebene um das Führungszentrum (sogenannte *odd-even*-Bewegung [58]). Wichtig ist, dass für anwachsendes  $\omega_c \Delta t$  der  $\arctan\left(\frac{1}{2}\omega_c \Delta t\right)$  monoton mitwächst, jedoch durch  $\pi/2$  beschränkt bleibt. Man kann deshalb für den numerischen Gyrationsradius  $\rho_{num}$  folgende Abschätzung ansetzen

$$\rho_{num} = \frac{v_{\perp}}{\omega_{num}} = \frac{v_{\perp}}{\Theta} \Delta t \stackrel{(3.24)}{=} \frac{v_{\perp}}{2 \cdot \arctan\left(\frac{1}{2}\omega_c \Delta t\right)} \Delta t$$

$$\stackrel{(\omega_c \Delta t \to \infty)}{\longrightarrow} \frac{v_{\perp}}{\pi} \Delta t \qquad (3.51)$$

An diesem Ausdruck sieht man, dass der numerische Gyrationsradius für  $\omega_c \Delta t \gg 1$  linear mit  $\Delta t$  anwächst, genau so, wie in [59] postuliert wird. Um diese Aussage zu untermauern, wird hier das Ergebnis eines kurzen, numerisches Experiments mit dem Boris-Solver wiedergegeben. Dazu wird ein einziges Teilchen in ein Magnetfeld gegeben. Die Anfangssituation ist wie folgt eingestellt (Tabelle (3.1)):

Verhältnis	q/m = -1  C/kg
Anfangsposition	$\vec{r}_0 = (0;0;0)$
Anfangsgeschwindigkeit	$\vec{v}_0 = (2;0;2)$ m/s
Magnetisches Feld	$\vec{B} = (5;0;0) \text{ T}$

Tabelle 3.1: Physikalische Daten des Testteilchens

Damit ergeben sich folgende, analytische Charakteristika für die Teilchenbewegung (Tabelle (3.2)):

Zu $\vec{B}$ senkrechte Anfangsgeschwindigkeit	$ec{v}_{\perp}=(0;0;2)$ m/s
Zu $\vec{B}$ parallele Geschwindigkeit	$ec{v}_{\parallel}=(2;0;0)$ m/s
Gyrationsfrequenz	$\omega_c = \frac{ q  B}{m} = 5 1/s$
Gyrationsradius	$\rho_c = \frac{v_\perp}{\omega_c} = 0, 4 \text{ m}$
Führungszentrum	$\vec{R} = (t \cdot v_{\parallel}; -0, 4 \text{ m}; 0)$

Tabelle 3.2: Analytische Daten für die Teilchenbewegung

Nun wird der Boris-Solver gemäß 3.2 für verschiedene Werte  $\omega_c \Delta t$  gestartet und der sich ergebende, numerische Gyrationsradius gespeichert. Das Ergebnis dieser Untersuchung ist Abbildung (3.7) zu entnehmen (vgl. auch Abb. 2 in [59]).

Man sieht deutlich, dass der numerische Radius mit zunehmender Schrittweite ansteigt. Auch ist (3.7) zu entnehmen, dass der Zuwachs für große Werte von  $\omega_c \Delta t$  in eine näherungsweise lineare Steigung übergeht. Interessanterweise beträgt der Wert für  $\rho_{num}/\rho_c$  an der Stelle  $\omega_c \Delta t = 0,35$ 

$$\frac{\rho_{num}}{\rho_c} \approx 0,015 \tag{3.52}$$

Das bedeutet, dass sich der a priori selbstgesteckte Fehler  $\delta = 1 \%$  für die Gyrationsfrequenz (vgl. (3.48)) nahezu identisch auf den Fehler im Radius überträgt.

Betrachtet man die komplette Teilchenbewegung für obiges Testszenario (Darstellung (3.8)) und deren Projektion in die yz-Ebene (Darstellung 3.9)), sieht man, dass für  $\omega_c \Delta t = 1$  der Gyrationsradius zwar zu groß, das Gyrationszentrum hingegen richtig wiedergegeben wird.

Dass dies tatsächlich eine Eigenschaft des Leap-Frog-Boris-Schemas ist und auch für alle andere Drifts erster Ordnung seine Gültigkeit behält wird anschaulich in [58] (Abb. 1-4) belegt und diskutiert. Es wird gezeigt, dass die Bewegungsgleichung für das Führungszentrum, wie sie aus dem System (3.5) bestimmt werden können, zu denen von Northrop [20] (auch Glg. (3.66)) identisch sind.



Abbildung 3.7: Gyrationsradius bei ansteigender Zeitschrittweite



Abbildung 3.8: Teilchengyration für kleine ( $\omega_c \Delta t = 0, 1$ ) und große Zeitschritte ( $\omega_c \Delta t = 10$ )

Aus diesem Grund und dem Umstand geschuldet, dass sie für eine neue, erweiterte Anwendung des Boris-Solvers wichtig werden, sollen diese Gleichungen im nächsten Abschnitt kurz bereitgestellt werden.

# 3.4 Die Führungszentrums-Bewegung

In diesem Abschnitt werden die Bewegungsgleichungen des Führungszentrums (*guiding-center*) eines Teilchens rekapituliert. Dafür werden kurz die wichtigsten Punkte und Resultate aus [20] zusammengetragen und für die hießigen Belange modifiziert.

Ausgangspunkt der Untersuchungen ist die Bewegungsgleichung eines geladenen Teilchens an



Abbildung 3.9: Projektion von Abb. (3.8) in die yz-Ebene

der Stelle  $\vec{r}$  in zunächst beliebigen Feldern

$$\frac{m}{q}\ddot{\vec{r}} = \vec{E}(\vec{r},t) + \left(\dot{\vec{r}} \times \vec{B}(\vec{r},t)\right)$$
(3.53)

Für alle weiteren Einordnungen der verschiedenen Größen wird der Kleinheitsparameter  $\varepsilon$  folgendermaßen definiert

$$\varepsilon := \frac{m}{q} \tag{3.54}$$

Wie in [20] eindringlich diskutiert wird, ist es natürlich nicht möglich,  $\varepsilon$  künstlich zu verkleinern. Das heißt eine asymptotische Untersuchung mit  $\varepsilon \longrightarrow 0$  hätte wenig Sinn. Jedoch lässt sich Gleichung (3.53) auf einen äquivalenten Ausdruck für dimensionslose Größen transformieren. In diesem dimensionslosen System nimmt der  $\varepsilon$  entsprechende Koeffizient  $\varepsilon'$  die Form

$$\varepsilon \hat{=} \varepsilon' := \frac{\rho}{L} \tag{3.55}$$

an. Dabei sind  $\rho$  der Gyrationsradius und L die charakteristische Länge, über der die Felder variieren. Im in [20] vorgestellten Äquivalenzsystem ist es also durchaus möglich,  $\varepsilon'$  zu verkleinern und somit eine Theorie, die auf die verschiedenen Ordnungen von Termen in  $\varepsilon'$ baut, aufzuziehen. Die so gewonnenen Lösungen behalten dann ihre Gültigkeit für die ursprünglichen Gleichungen (3.53). Durch einfache Rücktransformationen können wieder die dimensionsbehafteten Lösungen generiert werden. Das heißt, man arbeitet im Folgenden mit den Ausdrücken aus (3.53). Immer jedoch, wenn man von einer Näherung für  $\varepsilon \ll 1$  spricht, bezieht man sich eigentlich auf  $\varepsilon'$  und nutzt die besprochene Möglichkeit, das simultane, dimensionslose System zu diskutieren. Die Forderung nach einem kleinen  $\varepsilon$  ist dabei deckungsgleich zu der Standardbedingung, welche man an die *adiabatische Invarianz* des *magnetischen*  *Moments*  $\mu$  (3.65) knüpft [20]. Um nun von der vollständigen Bewegungsgleichung (3.53) zu einer Führungszentrumsgleichung zu gelangen, wird  $\vec{r} = \vec{R} + \vec{\rho}$  in (3.53) eingesetzt. Hierbei bezeichnet  $\vec{R}$  die Ortskoordinate des Führungszentrums (siehe Abb. (3.10)).



Abbildung 3.10: Bezeichnungsweise für die Beschreibung der Führungszentrumsbewegung

Um zu einer Definition von  $\vec{\rho}$  zu gelangen, teilt man als ersten Schritt die zu  $\vec{B}$  senkrechte Geschwindigkeit  $\vec{v}^{\perp}$  des Teilchens in die schnelle Gyrationsgeschwindigkeit  $\vec{v}^{\perp}_{gyro}$  und die senkrechte Driftbewegung  $\vec{v}^{\perp}_D$ , so wie in Abbildung (3.10) angedeutet, auf. Damit ergibt sich der normierte Gyrationsvektor  $\vec{\rho}_0$  wie folgt aus den normierten Richtungen (Index 0)

$$\vec{\rho}_0 = \vec{B}_0 \times \vec{v}_{gyro\ 0}^\perp \tag{3.56}$$

Da für den Betrag  $\rho$  gelten muss

$$\rho = \frac{\left|\vec{v}_{gyro}^{\perp}\right|}{\omega_c} = \frac{\left|\vec{v}_{gyro}^{\perp}\right| \ m}{q \ B}$$
(3.57)

folgt insgesamt

$$\vec{\rho} = \frac{m}{q \ B^2} \ \vec{B} \times \vec{v}_{gyro}^{\perp} = \frac{m}{q \ B^2} \ \vec{B} \times \left( \vec{v}^{\perp} - \vec{v}_D^{\perp} \right)$$

Man beachte, dass um den Drehsinn der Gyrationsbewegung in der Definition (3.58) zu berücksichtigen, q vorzeichenbehaftet ist. Dabei ist es für eine Theorie in  $\varepsilon^1$  unerheblich, ob die Felder an der Stelle  $\vec{R}$  oder  $\vec{r}$  berechnet werden [20]. Diese Bemerkung ist deshalb wichtig, da sie es erlaubt, eine eventuelle Versetzung hin zum Führungszentrum im Rahmen der adiabtischen Näherung rückgängig zu machen. Zusätzlich ist es wichtig, zu bemerken, dass  $\vec{\rho}$ , nach Gleichung (3.58), mit dem Vorfaktor m/q schon  $\mathcal{O}(\varepsilon^1)$  ist. Darum werden zu dessen numerischer Definition (siehe Gleichung (3.73) in Abschnitt 3.4.2), nur Driftgeschwindigkeiten  $\vec{v}_D^{\perp}$  nullter Ordnung in  $\varepsilon$  herangezogen.

Nachdem  $\vec{\rho}$  wohldefiniert ist, fährt man fort, indem man die rechte Seite von (3.53) in einer Taylorreihe bis zur ersten Ordnung um  $\vec{R} = \vec{r} - \vec{\rho}$  entwickelt. Es ergibt sich (analog [20])

$$\frac{m}{q} \left( \ddot{\vec{R}} + \ddot{\vec{\rho}} \right) \doteq \vec{E}(\vec{R}, t) + \mathcal{J}_{\vec{r}\,'} \left( \vec{E}(\vec{r}\,', t) \right) \Big|_{\vec{R}} \cdot \vec{\rho} \\
+ \left( \dot{\vec{R}} + \dot{\vec{\rho}} \right) \times \vec{B}(\vec{R}, t) \\
+ \left( \dot{\vec{R}} + \dot{\vec{\rho}} \right) \times \mathcal{J}_{\vec{r}\,'} \left( \vec{B}(\vec{r}\,', t) \right) \Big|_{\vec{R}} \cdot \vec{\rho} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$
(3.58)

Hierbei bezeichnet  $\mathcal{J}_{\vec{r}}$  die *Jacobi-Matrix* [60] bezüglich  $\vec{r}$ . Legt man weiterhin eine orthonormierte Basis  $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$  mi  $\vec{e}_1 \parallel \vec{B}$  (vgl. Skizze (3.10)) fest, so lässt sich  $\vec{\rho}$  wie folgt darstellen

$$\vec{\rho} = \rho \left( \vec{e}_2 \, \sin(\Theta) + \vec{e}_3 \, \cos(\Theta) \right) \tag{3.59}$$

Führt man noch die Gyrationsfrequenz über

$$\dot{\Theta} = \omega_c = \frac{|q|B}{m} \tag{3.60}$$

ein, so kann die Winkelkoordinate  $\Theta$  in Gleichung (3.58) als Ortsvariable betrachtet werden. Damit kann man über eine Gyrationsperiode mitteln

$$<\ldots>:=\int_{0}^{2\pi}\ldots\,d\Theta\tag{3.61}$$

Man erhält

$$\frac{m}{q} < \ddot{\vec{R}} + \ddot{\vec{\rho}} > \stackrel{(3.58)}{=} < \vec{E}(\vec{R},t) + \mathcal{J}_{\vec{r}\,'} \left(\vec{E}(\vec{r}\,',t)\right) \Big|_{\vec{R}} \cdot \vec{\rho} > \\
+ < \left(\dot{\vec{R}} + \dot{\vec{\rho}}\right) \times \vec{B}(\vec{R},t) > \\
+ < \left(\dot{\vec{R}} + \dot{\vec{\rho}}\right) \times \mathcal{J}_{\vec{r}\,'} \left(\vec{B}(\vec{r}\,',t)\right) \Big|_{\vec{R}} \cdot \vec{\rho} > + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (3.62)$$

Mit den mittels (3.59) und (3.61) nachzurechnenden Relationen

$$<\rho>=0; <\dot{\rho}>=0; <\ddot{\rho}>=0$$
 (3.63)

Ergibt sich aus (3.62)

$$\frac{m}{q}\ddot{\vec{R}} = \vec{E}(\vec{R},t) + \left(\dot{\vec{R}} \times \vec{B}(\vec{R},t)\right) 
+ \frac{\omega_c \rho^2}{2} \left(\vec{e}_2 \times (\vec{e}_3 \cdot \nabla_{\vec{r}\,\prime}) \vec{B}(\vec{r}\,\prime,t)\right|_{\vec{R}} 
- \vec{e}_3 \times (\vec{e}_2 \cdot \nabla_{\vec{r}\,\prime}) \vec{B}(\vec{r}\,\prime,t)\Big|_{\vec{R}} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$
(3.64)

Führt man das magnetische Moment  $\mu$  als adiabatische Invariante ein,

$$\mu := \left| \frac{\omega_c \, \rho^2}{2} \right| \doteq konst. \tag{3.65}$$

so liefert eine letzte Anstrengung in Vektoralgebra [61]

$$\frac{m}{q}\ddot{\vec{R}} = \left[ \left( \vec{E}(\vec{R},t) - \frac{\mu}{m} \nabla |B| \right) + \left( \dot{\vec{R}} \times \vec{B}(\vec{R},t) \right) \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$
(3.66)

Fasst man den ersten Term auf der rechten Seite zu einem verallgemeinerten, elektrischen Feld  $\vec{E^*}$  zusammen

$$\vec{E}^{*}(\vec{R},t) := \vec{E}(\vec{R},t) - \frac{\mu}{m} \nabla |B| , \qquad (3.67)$$

so erhält man verkürzt

$$\frac{m}{q}\ddot{\vec{R}} = \left[\vec{E}^*(\vec{R},t) + \left(\dot{\vec{R}} \times \vec{B}(\vec{R},t)\right)\right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$
(3.68)

Zusammen mit der Anfangsgeschwindigkeit für das Führungszentrum

$$\vec{v}_0^{gc} = \vec{v} \left( \vec{R}(0) \right) = \vec{e}_1 \cdot \langle \vec{e}_1, \vec{v} \big( \vec{r}(0) \big) \rangle + \vec{v}_D^{\perp}$$
(3.69)

stellt (3.68) das grundlegende AWP für die Führungszentrumsbewegung dar. Bevor diese Erkenntnis in Form eines neue Führungszentrumsintegrators für PEPC-B instrumentalisiert wird, müssen an dieser Stelle noch ein paar wichtige Bemerkungen fallen (siehe auch [20]).

Wie sofort auffällt hat Gleichung (3.68), ohne den  $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ - Term, die identische Struktur wie die ursprüngliche Gleichung (3.53). Als exakte, analytische Lösung für  $\vec{R}(t)$  würde man also ebenso eine an Feldlinien gebundene, gyrierende Bewegung erwarten. Und in der Tat offenbart  $\vec{R}$  genau dieses Verhalten. Jedoch lässt sich zeigen, dass der Radius dieser neuen Gyrationsbewegung um eine Ordnung in  $\varepsilon$  kleiner ist als der echte Teilchengyrationsradius. Damit kann diese neuerliche *Führungszentrumshelix* in der hier angestrebten Ordnung der Theorie vernachlässigt werden.

Der Grund für diese Gyration liegt in der eher heuristischen Vorgehensweise (vgl. Kapitel 1.A in [20]) der hier schematisch dargestellten Herleitung von (3.66). Eine Zusammenfassung der Arbeiten [62] und [63] wie sie etwa in Kapitel 2 in [20] gegeben wird, erlaubt auch eine striktere, mathematische Behandlung des Führungszentrumsproblems. Man gelangt damit zu einer zu (3.66) äquivalenten Gleichung, allerdings für einen Ortsvektor  $\vec{R}_0$ , der dann keine Gyration mehr zeigt.

### 3.4.1 Erweiterung zum Führungszentrums-Integrator

Wie in 3.3.2 diskutiert, kann die Gyrationsfrequenz speziell von Elektronen eine starke, obere Grenze für die Wahl der Zeitschrittweite  $\Delta t$  bedeuten. Ein Weg, dieser Beschränkung zu begegnen, kann es sein, die Elektronen in Führungszentrumsnäherung zu behandeln [64]. Die Idee ist es, die Ladung der Elektronen nicht an deren wahren Position, sondern an ihrem Führungszentrum zu situierten. Der Fehler, der hierdurch gemacht wird, ist also im Coulomb-Potential in der Größenordnung des Elektronengyrationsradius

$$\rho_{elek} = \frac{v^{\perp}}{\omega_c^{(e)}} \ll \bar{l} \tag{3.70}$$

und damit vernachlässigbar klein gegenüber den typischen mittleren Teilchenabständen  $\overline{l}$  (siehe Abschnitt 6.1). Der Gewinn hingegen, den man dadurch erzielt, besteht hauptsächlich darin, dass man die Elektronengyration nicht mehr auflösen muss. Damit ist die limitierende Größe nur noch die niedrigere Plasmafrequenz (beachte Abbildung (3.6)), und somit kann der Zeitschritt  $\Delta t$  entsprechend größer gewählt werden (siehe Abschnitt 3.4.3). Diese Möglichkeit kann zum Einen Simulationen langwieriger Prozesse um Größenordnungen abkürzen, zum Anderen reduziert sie zusammen mit der insgesamt benötigten Anzahl an Zeitschritten auch etwaige, kumulative Fehler und bedingt somit einen Zuwachs an Genauigkeit.

Aus den oben genannten Gründen ist es offensichtlich erstrebenswert, einen solche Integrationsmöglichkeit auch für PEPC-B bereit zu haben. Deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit ein entsprechender, neuer Algorithmus entwickelt und realisiert. Er steht als neue Option (scheme = 9) in der Routine **integrator** zur Verfügung.

Im folgenden Abschnitt soll zunächst der schematische Aufbau und sein algorithmischer Ablauf beschrieben werden. Danach erfolgen die unerlässlichen Tests des Integrators für die wichtigsten Drifts erster Ordnung.

#### 3.4.1.1 Der Boris-Solver für das Führungszentrum

Wie im vorigen Abschnitt festgestellt, ist die Führungszentrumsgleichung (3.68) mit dem verallgemeinerten Feld (3.67) von der gleichen Bauart wie die ursprüngliche Bewegungsgleichung (3.53). Die naheliegendste Idee ist es dann, das selbe Integrationsschema zu ihrer Lösung zu instrumentalisieren. Zusammen mit dem Versatz (3.58) ist damit die Dynamik des Führungszentrum berechenbar. Die Frage, die es somit mit den anstehenden Tests zu klären gilt, ist es zu ergründen, ob dieses Schema numerisch stabiler ist, also ob auch für größere Zeitschritte  $\omega_c \Delta t \gg 1$  das Führungszentrum verlässlich berechnet wird. Folgt man der Abschätzung (3.48), so kann man davon ausgehen, dass der Integrator für  $\omega_c \Delta t = 0, 1$  das richtige Führungszentrum liefert. Im Bereich dünner Plasmen ist die nächst kleinere Zeitskala, die aufgelöst werden muss, die Plasmafrequenz (Abb. (3.6)). Betrachtet man beispielsweise Plasmen der Dichte  $n_e \sim 10^{16} \text{ m}^{-3}$  so liegt die Plasmafrequenz etwa zwei Größenordnungen unter der Gyrationsfrequenz eines Elektrons. Es genügt also prinzipiell zu überprüfen, ob der Führungszentrumsintegrator im Bereich  $\omega_c \Delta t \sim 100 - 1000$  stabil läuft.

## 3.4.2 Algorithmischer Ablauf des Führungszentrums-Integrators

Bevor die eigentlichen, numerischen Tests des Integrators beginnen, soll zuerst der algorithmische Ablauf, basierend auf den Formeln aus 3.4, zusammengetragen werden. Als Ausgangssituation sei ein Teilchen der Masse m an der Stelle  $\vec{r}$  und der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  gegeben. Außerdem seien  $\vec{B} = \vec{B}(\vec{r}, t)$  sowie  $\vec{E} = \vec{E}(\vec{r}, t)$  bekannt. Man berechnet nun vor dem ersten Zeitschritt der Reihe nach:

I.)

$$B := \left| \vec{B} \right| = \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$$
$$\vec{e}_1 := \frac{\vec{B}}{B}$$
$$\omega_c := \frac{q}{m}$$

II.)

$$\vec{v}^{\parallel} := \vec{e}_1 \langle \vec{e}_1, \vec{v} \rangle$$
  
 $\vec{v}^{\perp} := \vec{v} - \vec{v}^{\parallel}$ 

#### III.) Die senkrechten Drifts. Wie beispielsweise [7]

$$\vec{E} \times \vec{B}$$
-Drift :  $\vec{v}_{\vec{E} \times \vec{B}} := \frac{1}{B^2} \vec{E} \times \vec{B}$  (3.71)

$$\nabla B \text{-Drift} \quad : \quad \vec{v}_{\nabla B} := \frac{\frac{1}{2}m v^{\perp^2}}{q B^3} \vec{B} \times \nabla |\vec{B}| \tag{3.72}$$

und deren Summe

$$\vec{v}_D^\perp := \vec{v}_{\vec{E}\times\vec{B}} + \vec{v}_{\nabla B} + \ldots$$

. . .

IV.) Den Gyrationsradius (3.58)

$$\vec{\rho} = \frac{1}{\omega_c B} \vec{B} \times \left( \vec{v} - \vec{v}_{\vec{E} \times \vec{B}} \right) \tag{3.73}$$

*Bemerkung:* Wie in Kapitel I.C in [20] gezeigt wird, sind andere Drifts, wie etwa der  $\overline{\nabla B}$ -Drift, mindestens  $\mathcal{O}(\varepsilon^1)$  und spielen damit für eine Definition von  $\vec{\rho}$  in der Ordnung  $\varepsilon^1$  keine Rolle (vgl. Bemerkungen zur Definition (3.58) in Abschnitt 3.4).

V.) Anfangswerte für die Führungszentrumsbewegung (3.10) und (3.69)

$$\vec{R}_0 := \vec{r} - \vec{
ho}$$
  
 $\vec{v}_0^{\ gc} := \vec{v}_0^{\ \parallel} + \vec{v}_D^{\perp}$ 

VI.) Start des Leap-Frog-Boris-Schema (Abschnitt 3.2) mit den Werten aus V.).

#### 3.4.3 Tests des Führungszentrums-Integrators

In diesem Abschnitt soll die numerische Stabilität des Integrators bezüglich großer Zeitschritte getestet werden. Wie bereits erwähnt, genügen Werte von maximal  $\omega_c \Delta t = 1000$ , um ausreichend zu untersuchen, ob der Integrator fähig ist, die Lücke zwischen der Zeitskala der Gyrationsfrequenz und der Plasmafrequenz zu überbrücken. Für alle folgenden Testszenarios findet stets der gleiche Grundaufbau wie er in den Tabellen (3.1) und (3.2) zusammengetragen wurde Verwendung. Er wird dann, je nach zu untersuchendem Effekt, mit den entsprechenden Feldern modifiziert. In jedem Test werden insgesamt  $10^6$  Zeitschritte durchgerechnet.

Da 3d Abbildungen wie etwa (3.8) nur sehr unzureichend quantitativ ausgewertet werden können, wird in den anstehenden Prüfungen darauf verzichtet. Stattdessen werden gegebenenfalls Projektionen der Führungszentrumspositionen in die Koordinatenebenen gezeigt.

#### 3.4.3.1 Konstantes $\vec{B}$ -Feld, kein $\vec{E}$ -Feld

Betrachtet wird der exakt gleiche Aufbau wie in (3.1) tabelliert. In der Theorie erwartet man für die Position des Führungszentrums (vgl. Tabelle (3.2)) für beide Fällen  $\omega_c \Delta t = 0, 1$  und  $\omega_c \Delta t = 1000$  gerade Bahnen.

$$\vec{R}(t) = \begin{pmatrix} 2 \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} \cdot t \\ -0, 4 \mathbf{m} \\ 0 \end{pmatrix}$$
(3.74)

Tatsächlich zeigt eine quantitative Untersuchung, dass die Abweichungen zwischen dieser Kurve und den vom Integrator erzeugten Werten sowohl in y- als auch in z-Richtung im Rahmen

der Maschinengenauigkeit (*double precision*) nicht aufgelöst werden können. Dies gilt für beide Testszenarios. Der Integrator liefert also im einfachsten Fall eines konstanten B-Feldes eine Reproduktion des Führungszentrums deren Abweichung von der exakten Bahn de facto nicht mehr messbar ist.

#### **3.4.3.2** $\vec{\mathbf{E}} \times \vec{\mathbf{B}}$ -Drift

Ein weiterer Drift nullter Ordnung in  $\varepsilon$  ist der  $\vec{E} \times \vec{B}$ -Drift [7]. Die entsprechende Driftgeschwindigkeit ist

$$\vec{v}_{\vec{E}\times\vec{B}} = \frac{1}{B^2} \vec{E}\times\vec{B}$$
(3.75)

Um diese Driftbewegung gegenzurechnen, wird zu dem obigen Szenario (Tabellen (3.1) und (3.2)) noch ein konstantes elektrisches Feld hinzugefügt.

$$\vec{E} = \begin{pmatrix} 0\\1\\0 \end{pmatrix} \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{m}}$$
(3.76)

Für diesen Testfall ergibt sich

$$\vec{v}_{\vec{E}\times\vec{B}} = -0, 2 \, \frac{\mathsf{m}}{\mathsf{s}} \, \vec{e}_z$$
 (3.77)

Damit errechnet sich der Gyrationsradius (3.58) zu

$$\vec{\rho} = -0,44 \text{ m} \vec{e}_y$$
 (3.78)

Insgesamt ergibt sich die erwartete Kurve für das Führungszentrum wie folgt

$$\vec{R}(t) = \begin{pmatrix} 2 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \cdot t \\ -0,44 \mathrm{m} \\ -0,2 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \cdot t \end{pmatrix}$$
(3.79)

Ein quantitativer Vergleich für die entscheidende z-Richtung zeigt, dass die maximale Abweichung der numerischen  $z_{num}$ - von den theoretischen z-Werten der Führungszentrumsposition

$$\delta_z := \frac{||z_{num}| - 0, 2 \cdot t|}{0, 2 \cdot t} \lessapprox 10^{-6} \%$$
(3.80)

ist. Dieser verschwindend geringe Wert gilt sowohl für kurze als auch lange Simulationen. Somit ist auch hier kein Unterschied zwischen der akkuraten Rechnung mit  $\omega_c \Delta t = 0, 1$  und der zeitlich längeren mit  $\omega_c \Delta t = 1000$  festzustellen.

#### **3.4.3.3** ∇B-Drift

Als letzter Drift bleibt noch der  $\nabla B$ -Drift [7]. Um ihn zu testen, muss ein Aufbau gewählt werden, bei dem streng

$$\varepsilon \overset{(3.55)}{\ll} 1$$
 (3.81)

erfüllt ist. Für den  $\nabla B\text{-}\mathrm{Drift}$  heißt dies konkret

$$\frac{\rho}{\frac{B}{\nabla B}} \ll 1 \tag{3.82}$$

um dies zu gewährleisten und damit sicherzustellen, dass das magnetische Moment  $\mu$  (3.65) in guter Näherung als konstant angenommen werden kann, wird für  $\vec{B}$  folgender Ausdruck gewählt

$$\vec{B}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 50+y\\0\\0 \end{pmatrix} \mathbf{T} \Rightarrow \nabla B = \begin{pmatrix} 0\\1\\0 \end{pmatrix} \frac{\mathbf{T}}{\mathbf{m}}$$
(3.83)

Für die Geschwindigkeit des Drifts erhält man somit [7]

$$\vec{v}_{\nabla B} := -\frac{v_{\perp}^2}{2 \cdot \omega_c} \frac{\vec{B} \times \nabla B}{B^2} \approx -0,0008 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \vec{e}_z \tag{3.84}$$

 $\rho$  ergibt sich damit an der Stelle  $\vec{r} = 0$ 

$$\vec{\rho} \stackrel{(3.58)}{=} -0,04 \text{ m} \, \vec{e}_y$$
 (3.85)

Dies bedingt die theoretische Bahn des Führungszentrums zu

$$\vec{R}(t) = \begin{pmatrix} 2 \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} \cdot t \\ -0,04 \,\mathbf{m} \\ -0,0008 \,\frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}} \cdot t \end{pmatrix}$$
(3.86)

Entsprechende Ergebnisse, wie sie der Führungszentrumsintegrator liefert, sind in den Abbildungen (3.11), (3.12), (3.13) und (3.14) dargestellt.

Deutlich sieht man den Drift in die antizipierte negative z-Richtung. Die relativen Abweichungen in y- beziehungsweise z-Richtung ergeben sich zu

$$\delta_y = \frac{||y_{num}| - 0, 04|}{0, 04} \lessapprox 1, 5 \cdot 10^{-2} \%$$
(3.87)



**Abbildung** 3.11: Projektion des Führungszentrums für den  $\nabla B$ -Drift in die xy-Ebene ( $\omega_c \Delta t = 0, 1$ )



**Abbildung** 3.13: Projektion des Führungszentrums für den  $\nabla B$ -Drift in die xz-Ebene ( $\omega_c \Delta t = 0, 1$ )



0.08004

**Abbildung 3.14:** Relative Abweichung  $\delta_z$  (3.88) in z-Richtung für den  $\nabla B$ -Drift ( $\omega_c \Delta t = 1000$ )

4×10<sup>2</sup>

6×10

# Zeitschritte

8×10<sup>2</sup>

 $1 \times 10^{6}$ 

$$\delta_z = \frac{||z_{num}| - 0,0008 \cdot t|}{0,0008 \cdot t} \lessapprox 9,2 \cdot 10^{-2} \%$$
(3.88)

2×10<sup>2</sup>

 $\delta_{7}/\%$ 

0

Wobei sich hier, im Unterschied zu den bisher untersuchten Drifts, erstmalig bei großen Zeitschritten eine numerische Abweichungen in der y- als auch der z-Richtung andeuten (siehe Abb. (3.12) und (3.14)). Das endliche  $\delta_z$ , wie in Abbildung (3.14) gezeigt, nimmt seinen Maximalwert offensichtlich zu Anfang der Simulation an und schwankt dann im Bereich von  $\sim 10^{-5}\%$ . Um die Natur der y-Abweichung genauer zu untersuchen, wird die entsprechende Darstellung (3.12) nochmals höher aufgelöst abgebildet.

Darstellungen (3.15) und (3.16) identifizieren die numerische Abweichung als extrem schnelle





Abbildung3.15:ProjektiondesFührungszentrumsfürden $\nabla B$ -Driftindiexy-Ebene(höhere Auflösung von Abb. (3.12))

Abbildung3.16:ProjektiondesFührungszentrumsfürden $\nabla B$ -Driftindiexy-Ebene(höhere Auflösung von Abb. (3.15))

Oszillation. Dabei handelt es sich vermutlich um die Führungszentrumshelix wie sie im Kontext von Gleichung (3.68) definiert wurde. Die Abweichungen (3.87) und (3.88) zeigen jedoch, dass ihr Einfluss numerisch vernachlässigbar ist (beachte selbstvorgegebenen Fehler aus Abschnitt 3.3.2).

Als abschließende Bewertung der Tests ist zu konstatieren, dass der neu entwickelte Führungszentrumsintegrator äußerst stabil für große  $\Delta t$  läuft. Wie die Tests zeigen, reproduziert er den  $\vec{E} \times \vec{B}$ - und  $\nabla B$ -Drift, selbst für sehr große Zeitschritte. Damit ist er geeignet, Teilchen in Führungszentrumsnäherung zu berechnen.

Auf diese Art lässt sich die zeitliche Beschränkung, etwa durch die Elektronengyrationsfrequenz, aufheben [64].

Umschalten der Zeitschrittweite Die Simulationen für den beschriebenen Führungszentrumsintegrator, wie sie hier vorgestellt wurden, beschränken sich zunächst darauf, die Gyrationsbewegung der Elektronen auszublenden. Jedoch ist im Hinblick auf Anwendungen durch andere Codeklassen weiterführende Verwendungen denkbar. Man könnte etwa in nicht selbstkonsistenten Simulationen darüber nachdenken, Simulationen durch den Verzicht auf Genauigkeit abzukürzen. In diesem Kontext ist es denkbar, etwa auch für Ionen, zwischen Führungszentrumsnäherung und der vollen Kinetik zu wechseln. Man könnte dann, falls möglich, mit großen Zeitschritten arbeiten und gegebenenfalls den Versatz um  $\vec{\rho}$  (3.58) rückgängig machen, um bei kleinem  $\Delta t$  mit dem gleichen Integrator die volle Kinetik der Teilchen aufzulösen. Als Beispiel für eine solche Teilchenverfolgung wird nochmals die Bahn des Teilchens aus Tabelle (3.1) aufgezeichnet. Diesmal wird während der Simulation die Zeitschrittweite verändert.

Wie man Abbildung (3.17) entnimmt wird das Teilchen zuerst von seiner wahren Position auf sein Führungszentrum versetzt, und dann diesem zunächst mit großer Zeitschrittweite gefolgt. Nach den ersten 100 Zeitschritten wir der Zeitschritt verkleinert, der Versatz um das lokale  $\vec{\rho}$  rückgängig gemacht, um dann mit kurzen Zeitschritten die volle Gyrationsbewegung aufzulösen. 1000 Zeitschritte später wird der ganze Prozess in umgekehrter Reihenfolge nochmal



Abbildung 3.17: Ändern der Zeitschrittweite während einer Simulation

wiederholt.

Es ist zu bemerken, dass um beim Versatz von Führungszentrum auf die volle Gyrationsbewegung die richtige Teilchengeschwindigkeit zu gewährleisten wieder die schnelle Gyrationsgeschwindigkeit

$$\vec{v}_{auro}^{\perp} \stackrel{(3.58)}{=} \vec{v}^{\perp} - \vec{v}_{D}^{\perp}$$
(3.89)

aus Skizze (3.10) zur Führungszentrumsgeschwindigkeit hinzuaddiert werden muss.

# 3.5 Super-Teilchen

Abschließend zu diesem Abschnitt soll noch eine kurze jedoch entscheidende Bemerkung gemacht werden. Wenn in diesem oder folgenden Kapiteln die Rede von Teilchen ist, so sind prinzipiell immer Punktladungen gemeint, die viele echte, physikalische Teilchen auf sich vereinen. Der Grund hierfür ist, dass kein aktuelles Programm und kein verfügbarer Supercomputer alle Teilchen eines Plasmas mit Dichten von bis zu  $n = 10^{20-21}$  m<sup>-3</sup> eins zu eins simulieren könnte. Deshalb multipliziert man stets die Ladung der Teilchen mit einem Faktor, im Folgenden *Superteilchenfaktor*  $f_{sp}$  genannt [15]. Dies ist legitim und verändert die Dynamik der Teilchen nicht, sofern man auch deren Masse mit dem selben Faktor hochskaliert [26]. Nach dieser Prozedur hat man dann nicht 1-, sondern  $f_{sp}$ -Teilchen pro Punktladung. Im Kontext von kinetischen Teilchensimulationen spricht man deshalb auch oft von *Super*- oder *Macroteilchen*. Diese Terminologie soll auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit Verwendung finden.
# Kapitel 4 Schichtsimulationen mittels Tree-Codes

Ein bisheriges Defizit bei der Anwendung von gitterfreien Methoden war bislang das Fehlen eines gängigen Konzepts zur Realisierung fester Ränder. Jedoch ist es gerade der Einfluss dieser festen Strukturen, die es in der *P*lasma-Wand-Wechselwirkung (PWW) zu untersuchen gilt. In gitterbasierten Methoden wird, wie erwähnt, das Rechengebiet a priori eingeteilt. Diese vorangestellte Festlegung designierter Punkte macht es dann möglich, den vollen Satz an Maxwell-Gleichungen [42] auch mit festen Randbedingungen zu lösen. Leitende Wände können dabei durch Lösen eines Satzes von Gleichungen realisiert werden. Diese Ausdrücke beinhalten unter Anderen die Sprungbedingungen für die Normalkomponente des elektrischen Feldes am Übergang zwischen zwei Medien (siehe [42] Abschnitt *I.5*, Gleichung (*I.17*)). Zusätzlich geht man näherungsweise von einer homogenen Ladungsverteilung in der letzten Gitterzelle vor dem Leiter aus. Somit erhält man eine weitere Randbedingung für das Potential an den Gitterpunkten auf der Oberfläche (siehe Anhang C).

Ein erster Ansatz, entsprechende Übergangsschichten (*sheath*) zwischen einem Plasma und einer festen Wand mittels eines 1d Tree-Codes zu simulieren, wurde von Matyash et. al [46] unternommen. Zwar sind die erzielten Resultate bezüglich der Gegenüberstellung der räumlichen Auflösung von PIC- und Tree-Codes bemerkenswert 2.2.7, doch scheint die angewandte Methode für die Lösung des Wandproblems wenig flexibel. Die grundlegende Idee ist es hier, die Poisson-Gleichung speziell für das untersuchte Problem vorher analytisch zu lösen. Die Multipolentwicklung der so gewonnenen Lösung kann dann als neuer Potentialkern des Tree-Codes verwendet werden 2.2.5. Offensichtlich ist dies ein gangbarer, doch schwer zu verallgemeinernder Weg. Eine andere Idee aus der technischen Anwendung gitterfreier Methoden ist es, die entsprechenden partiellen Differentialgleichungen auf dem Rand zu diskretisieren und sie separat zu lösen. Diese sogenannte "Boundary-Element-Method" [65] ist jedoch in der Realisierung und der numerischen Ausführung äußerst komplex. Dies ist ein Grund, warum ihre Anwendungen in der Plasmaphysik bisher so rar sind und sie bis dato nur für sehr einfache, spezialisierte Geometrien und physikalische Modelle getestet wurden [30].

Es ist also zu resümieren, dass es bisher kein einschlägiges Konzept für die Realisierung fester Strukturen und ihrer Schnittstellen zum Hauptplasma für gitterfreien Methoden gibt. Da aber ein erfolgreicher Einsatz des Tree-Codes in der PWW-Simulation solche Ansätze unausweichlich einfordert, wurden im Rahmen dieser Arbeit entsprechende Prozeduren entwickelt und getestet. Diese umfassen einen einfachen und flexiblen Ansatz zur Simulation leitender Oberflächen 4.0.1. Nachdem das entsprechende Konzept vorgestellt wurde, wird ein passendes Testszenario diskutiert (4.1). Namentlich handelt es sich dabei um das sogenannte eindimensionale (1d) Schicht-Problem (*sheath-scenario*). Zum Einen ist die Wahl dieses numerischen Experiments für den angestrebten Test inhaltlich vorgegeben, zum Anderen ist es ein bestens theoretisch [66] und numerisch untersuchtes Phänomen. Gerade die Fülle an verfügbaren Simulationsergebnissen, (für einen guten Überblick siehe Tabelle 1 in [57]) und die Beschränkung auf 1d ebene Probleme eröffnet die Möglichkeit des direkten Vergleichs wie er in Abschnitt 5.4 durchgeführt wird.

#### 4.0.1 Leitende Wand

Um eine leitende Wand zu simulieren, gibt es, wie in der Einleitung besprochen, für gitterfreie Methoden kein einheitliches Konzept. Alle bisher vorgeschlagenen Wege sind stark an die zu untersuchenden Geometrien gebunden und damit sehr unflexibel [30, 65]. Des Weiteren passen sie nicht völlig in das vollständige "ab initio-Credo" des numerischen Instruments.

Aus diesen Gründen wurde eine neue, einfache Methodik entwickelt. Die Idee ist es, die Wand innerhalb der gitterfreien Doktrin zu realisieren. Da einer der grundlegenden Gedanken der besagten Code-Klasse die Potentialberechnung direkt an Teilchenorten ist, ist es naheliegend, die Wände durch unbewegliche Teilchen zu repräsentieren. Diese Ladungsträger werden im Folgenden mit *Wandteilchen* bezeichnet. Der Ansatz ist es also, die zu untersuchenden Wandelemente aus Flächen von Wandteilchen zu generieren. Die Ladung dieser fiktiven Teilchen wird dabei variabel gehalten. Das heißt, die Wand kann sich während der Simulation auf- und gegebenenfalls entladen. Die räumliche Stationarität wird gewährleistet, indem die Wandteilchen von der numerischen Integration der Bewegungsgleichung ausgespart werden. Sie bewegen sich damit nicht während des Laufes.

Um eine homogen geladene Fläche möglichst exakt darzustellen, muss der Abstand zwischen einzelnen Wandteilchen  $d_{sp}$  kleiner sein als die kleinste, auftretende physikalische Längenskala. Das heißt in den meisten Fällen

$$d_{sp} \le \lambda_D \tag{4.1}$$

Wobei

$$\lambda_D := \sqrt{\frac{\varepsilon_0 T_e}{n_e e^2}} \tag{4.2}$$

wieder für die Elektronen Debye-Länge steht [67]. Als Mechanismus, welcher die Wandebene als Äquipotentialfläche stabil hält wird die Ladung eines auftreffenden Teilchens gleichmäßig auf alle  $N_{Wand}$  Wandteilchen verteilt. Das heißt, trifft ein Teilchen mit der Ladung  $q_{tr}$  auf die Wand, so ändert sich die Ladung aller Wandteilchen um

$$\Delta q = \frac{q_{tr}}{N_{Wand}} \tag{4.3}$$

Da es in Tree-Codes jedoch keinen anderen äußeren Mechanismus gibt, der das Potential an irgendeiner Stelle in der Simulationsbox auf einen festen Wert hält, muss separiert getestet wer-

den, ob die Wand während der Simulation wirklich eine Äquipotentialfläche ist. Dies geschieht in Abschnitt 4.5.

<u>Bemerkung</u>: Wichtig für das physikalische Verständnis des hier vorgestellten Konzepts, ist es zu bemerken, dass es das Prinzip des Wandteilchenmodells ist, die Oberflächenladungsdichte  $\sigma$  an einer bestimmten Stelle im System vorzugeben. Das bedeutet, man arbeitet hier im Sinne der klassischen Elektrodynamik mit Von Neumann Randbedingungen (vgl. hierzu [42] Abschnitt 1.8).

$$\sigma = \varepsilon_0 \frac{\partial \phi}{\partial n} \tag{4.4}$$

 $(\phi \text{ ist wieder das elektrostatische Potential})$  Wie in [42] (Abschnitt 1.9) diskutiert wird, sind die unter diesen Randbedingungen gewonnenen Potentiallösungen immer nur bis auf eine Integrationskonstante genau. Dieser Sachverhalt spiegelt sich dann auch in den hier erzielten Resultaten wider.

In diesem Kontext ist also klar, dass eine Gleichverteilung der Ladung auf die Wandteilchen (Glg. (4.3)) aus Symmetriegründen eine Äquipotentialfläche bedingen muss.

Für anders geformte Flächen oder Gebilde mit Kanten, kann das Auffinden der, einer Äquipotentialfläche entsprechenden, Ladungsverteilung hingegen eine nicht triviale Aufgabe sein.

Beim Initialisieren der Wandteilchen ist darauf zu achten, dass die Wandteilchen jedes für sich schwach geladen ist etwa

$$q_{Wand} = \pm e \cdot 10^{-6} \tag{4.5}$$

, wobe  $e \approx 1,6022 \cdot 10^{-19}$  C die Elementarladung ist. Um die Wand in Gänze ladungsneutral zu halten, werden die Wandteilchen abwechselnd positiv und negativ geladen. Der Grund hierfür ist, dass der Tree-Code zu Anfang, wenn die Simulationsteilchen noch weit weg sind von der Wand, Pseudoteilchen ausschließlich aus Wandteilchen bildet. Diese Pseudoteilchen werden, wie in Abschnitt 2.2.1 beschrieben, an den jeweiligen Ladungsschwerpunkten  $\vec{r}_S$ 

$$\vec{r}_S := \frac{\sum_i q_i \vec{r}_i}{Q} \tag{4.6}$$

zusammengefasst. Für komplett ladungsneutrale Ensemble (Q = 0) ist (4.6) damit singulär und würde einen Abbruch des Programms bedingen. Die Initialisierungsladungen (4.5) werden dann, sobald die ersten Simulationsladungen auf die Wand treffen, wie erläutert, durch deren Ladungen ersetzt.

Das so begründete Wandteilchenkonzept wird im Folgenden (4.1) einer eingehenden Prüfung unterzogen. Dazu wird in Paragraph 4.2 ein entsprechendes Simulationsszenario vorgestellt und detailliert besprochen. Zunächst soll jedoch die zugrundeliegende Theorie des gewählten Testszenarios beleuchtet werden.

# 4.1 Die Schicht

Eines der ältesten Probleme bei der Behandlung ionisierter Gase ist die Untersuchung eines Plasmas in Kontakt mit einer festen Wand. Trotz des Alters dieser Fragestellung und trotz der Aktualität für die moderne Fusionsforschung ist die Theorie hinter den beobachtbaren Prozessen bis heute noch nicht vollständig verstanden. Die Texte, welche sich mit dem Problem beschäftigen, sind demzufolge zahlreich und reichen von rein theoretischen Abhandlungen [2, 66, 68, 69, 70] über Simulationsszenarios [21, 57, 71, 72] bis hin zu didaktisch aufbereiteten Texten [3, 67]. An dieser Stelle der Arbeit sollen die wichtigsten Punkte der diesbezüglichen Theorie zusammengetragen und später relevante Ausdrücke und Probleme motiviert werden. Die Gliederung bedient daher eine kurze allgemeine Einführung in die Fragestellung der *Schichtbildung (sheath formation)*. Wobei in dieser Arbeit die Diskussion auf sogenannte 1d Schicht Probleme beschränkt bleibt. Darin enthalten ist die wohl gängigste Begründung des sogenannten *Bohm-Kriteriums*. Nach einer erläuternden, physikalischen Diskussion über dessen Bedeutung wird das Bohm-Kriterium auf allgemeinere, kinetische Art reformuliert. Im letzten Teil des vorliegenden Abschnitts soll dann noch eine kurze Sensibilisierung für geforderte Effekte, welche eine stabile Vorschicht bedingen, erfolgen.

#### 4.1.1 Grundlegende Theorie und Bohm-Kriterium

Eine Eigenschaft, welche Plasmen inhärent auszeichnet, ist es, etwaige elektrostatische Störungen durch kollektive Effekte abzuschirmen oder auszugleichen. Somit kann weitestgehend ein quasineutraler und feldfreier Zustand beibehalten werden. Es ist daher nicht verwunderlich, dass ein ähnlich gelagerter Vorgang eine Wand oder eine andere feste Struktur vom Hauptplasma abschirmt (Kapitel 3 in [73]). Eine grundlegende Vorstellung über die ablaufenden Prozesse und Begriffe gewinnt man aus der Darstellung (4.1)



Abbildung 4.1: Skizze der Schicht und Vorschicht sowie schematischer Potentialverlauf

Kommt ein Plasma in Kontakt mit einer elektrisch leitenden, nicht geerdeten Wand, werden die aufgrund der geringeren Masse mobileren Elektronen diese Platte schnell aufladen. Diese lokalisierte negative Ladung generiert ein zur Wand hin abfallendes Potential, wie es in (4.1)

skizziert ist. Das einhergehende elektrische Feld wirkt nun in zweierlei grundlegenden Arten auf die Plasmateilchen:

- 1. Die Elektronen werden von der Wand abgestoßen.
- 2. Die Ionen werden zur Wand hin beschleunigt.

In Kombination führen diese beiden Effekte zu einem Gleichgewichtszustand, in dem gleich viele Elektronen wie Ionen die Wand treffen. Dieser *ambipolare Fluss* entnimmt dem System also keine Nettoladung mehr. Neben diesem dynamischen Phänomen stellt sich statisch eine positive Raumladungszone  $(n_i > n_e)$  direkt vor der Wand ein. Diese begrenzt zum Einen den Ionenstrom. Zum Anderen bewirkt sie die bereits thematisierte, vom System angestrebte Abschirmung der Wand vom Hauptplasma. In diesem Bereich, den man prägnant als *Schicht* (*sheath*) bezeichnet, findet nahezu der gesamte Potentialabfall statt. Seine Ausdehnung vor der Wand liegt in der Größenordnung der Elektronen Debye-Länge  $\lambda_D$ .

Der vermutlich einfachste Weg, das Problem zu betrachten, ist die ursprüngliche, von Bohm [73] verfolgte Idee, indem man von einem homogenen Ionenstrom mit  $T_i = 0$  ausgeht. In der 1d Schicht ( $n_i \neq n_e$ ) für einfach geladene Ionen gilt die 1d Poisson-Gleichung

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0} \left( n_i - n_e \right) \tag{4.7}$$

(1d Problem  $\Rightarrow \partial/\partial y = \partial/\partial z = 0$  für alle Größen) Da der Potentialwall, hervorgerufen durch die negativ geladene Wand, nur für die energiereichsten Elektronen durchdringbar ist, der Großteil jedoch daran abprallt, können diese als thermalisiert betrachtet werden (vgl. Abschnitt 5.1.1).

In der Schicht geht man daher von einer dem Boltzmann-Faktor folgenden Elektronendichte aus [3]

$$n_e = n_0 \, \exp\left\{\frac{e\phi}{T_e}\right\} \tag{4.8}$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit gelte hier  $\phi < 0$  (Skizze (4.2)). In diesem Zusammenhang ist zu bedenken, dass die genaue Lage der Schichtkante schwer zu bestimmen ist.

Abbildung 4.2: Skizze des Potentialverlaufs und Bezeichnungen in der Schicht

Wie Riemann betont [66], ist die hier durchgeführte Analyse genau genommen nur auf einer Skala in der Größenordnung der Schicht (*sheath scale*)

$$\xi = \mathcal{O}(\lambda_D) \tag{4.9}$$

gültig. Das heißt, dass für eine Wand bei  $\xi = 0$  (Abb. (4.2)) die asymptotischen Randbedingungen

$$\phi \longrightarrow 0; (\xi \to -\infty)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \longrightarrow 0; (\xi \to -\infty)$$
(4.10)

für die Annäherung von rechts an die Schichtkante  $(\xi\to -\infty)$ gelten. Aus der Energieerhaltung für die Ionen

$$\frac{1}{2}m_i v_i^2 = -e\phi + \frac{1}{2}m_i v_0^2 \iff v_i = \sqrt{\frac{-2e\phi}{m_i} + v_0^2}$$
(4.11)

folgt, zusammen mit der vorausgesetzten Kontinuität des Ionenstroms

$$j_0 = n_0 v_0 = n_i v_i = j_i \tag{4.12}$$

insgesamt

$$n_i = n_0 \frac{v_0}{v_i} \stackrel{(4.11)}{=} n_0 \left( 1 - \frac{2e \phi}{m_i v_0^2} \right)^{-1/2}$$
(4.13)

In einer beliebig kleinen, punktierten Umgebung der Schichtkante gilt nun

$$0 < \left| \frac{2e \phi}{m_i v_0^2} \right| \ll 1$$
  
bzw. 0 < 
$$\left| \frac{e \phi}{T_e} \right| \ll 1$$
 (4.14)

was eine Potenzreihenentwicklung von (4.8) und (4.13) bis zur ersten Ordnung in  $\phi$  erlaubt

$$(4.8) \Rightarrow n_e \doteq n_0 \left( 1 + \frac{e\phi}{T_e} \right) \tag{4.15}$$

(4.13) 
$$\Rightarrow n_i \doteq n_0 \left( 1 + \frac{1}{2} \frac{2e \phi}{m_i v_0^2} \right) = n_0 \left( 1 + \frac{e \phi}{m_i v_0^2} \right)$$
 (4.16)

Setzt man diese Entwicklungen in die Poisson-Gleichung (4.7) ein, erhält man

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = -\frac{e n_0}{\varepsilon_0} \left( \frac{e \phi}{m_i v_0^2} - \frac{e \phi}{T_e} \right)$$
$$= \frac{e^2 n_0}{\varepsilon_0} \left( \frac{1}{T_e} - \frac{1}{m_i v_0^2} \right) \cdot \phi$$
(4.17)

Für eine nicht oszillierende Lösung fordert man

$$\left(\frac{1}{T_e} - \frac{1}{m_i v_0^2}\right) \stackrel{\geq}{=} 0 \tag{4.18}$$

was sofort auf die einfachste Formulierung des Bohm-Kriteriums ( $T_i = 0$ ) führt

$$v_0 \ge \sqrt{\frac{T_e}{m_i}} \tag{4.19}$$

In Worten ausgedrückt besagt Ausdruck (4.19), dass die Ionen an der Schichtkante eine Mindestgeschwindigkeit

$$c := \sqrt{\frac{T_e}{m_i}} \left( \text{für } T_i = 0 \right) \tag{4.20}$$

innehaben müssen.

#### 4.1.1.1 Diskussion

Die hier erzielten Ergebnisse dürfen nicht dahingehend fehlinterpretiert werden, dass sie globale Aussagen über die komplette Schicht treffen [66]. Ihre Aussagekraft ist auf die benannte Umgebung um die Schichtkante beschränkt. Also dort, wo die eingesetzte Näherung (4.14) Gültigkeit besitzen. In diesem Sinne hat auch die Forderung nach einer *nicht oszillierenden* Lösung von (4.17) keinen Globalitätsanspruch. Mit dem Ausschließen der Schwingungen ist nur das an der Schichtkante mögliche, lokale Plasmaverhalten vermieden. Mathematisch gesprochen würde eine oszillierende Lösung gegen die eingeführten Randbedingungen (4.10) verstoßen.

Eine interessante, bildliche Erklärung liefert hingegen [73]. Die negative Wand sorgt demnach nicht nur für eine positive Beschleunigung der Ionen auf die Wand, sondern hat gleichermaßen eine negative Beschleunigung der Elektronen in entgegengesetzter Richtung zur Folge. Beide Effekte zusammen bewirken demzufolge sowohl eine Abnahme der Ionen- als auch der Elektronendichte an der Schichtkante. Das Bohm-Kriterium ist nun in der Art lesbar

$$\frac{\partial n_i}{\partial |\phi|} - \frac{\partial n_e}{\partial |\phi|} \stackrel{(4.15)(4.16)}{=} n_0 e\left(\frac{1}{T_e} - \frac{1}{m_i v_0^2}\right) \tag{4.21}$$

Wobei  $\phi < 0$  berücksichtigt wurde. Ein Vergleich mit (4.18) zeigt nun, dass das Bohm-Kriterium in einer beliebig kleinen Umgebung  $U_{se}$  der Schichtkante, äquivalent der Forderung

$$\frac{\partial}{\partial |\phi|} \left( n_i - n_e \right) \bigg|_{\phi \in \mathcal{U}_{se}} \ge 0 \tag{4.22}$$

 $(se \cong sheath edge)$  ist. Das heißt, wenn im Plasmabereich  $n_i = n_e$  gilt, muss an der Schichtkante die Ionendichte langsamer abfallen als die Elektronendichte. Andernfalls würde sich durch den fortgesetzten Abfluss von Ionen eine negative Ladung kumulativ anhäufen. Jenseits eines gewissen Grenzwertes würde diese die Beschleunigung der Ionen durch die negative Wand kompensieren und die positiven Ladungen in eine Plasmaschwingung an der Schichtkante versetzen. Diese Plasmaoszillation ist der eigentliche Inhalt der ausgeschlossenen Lösung im Vorfeld zu (4.17).

Mit dieser Bedingung an die Dichten lässt sich nun auch verstehen, warum das Bohm-Kriterium eine Mindestgeschwindigkeit für die Ionen einfordert. Startpunkt ist die Entwicklung (4.16)

$$n_{i} = n_{0} \left( 1 + \frac{e \phi}{m_{i} v_{0}^{2}} \right) = n_{0} \left( 1 - \frac{1}{m_{i}} \frac{\Delta E_{kin}}{v_{0}^{2}} \right)$$
(4.23)

Dabei ist  $-e\phi = \Delta E_{kin}$  der Zugewinn der Ionen an kinetischer Energie in der reibungsfreien Schicht. Damit ist prägnant in einer Formel ausgedrückt, was Stangeby in Abschnitt 2.4 [3] erläutert. Anhand von (4.23) sieht man, dass bei gleicher Beschleunigung die Ionendichte näherungsweise linear mit der Steigung

$$\mu \propto \frac{1}{v_0^2} \tag{4.24}$$

abnimmt. Im Kontext des zuvor Gesagten bedeutet dies nun, dass, wenn die Abnahme der Ionendichte zu stark, also

$$\frac{1}{v_0} \operatorname{zu} \operatorname{groß} \iff v_0 \operatorname{zu} \operatorname{klein}$$
(4.25)

ist, diese schneller als die Elektronendichte fällt und damit aus den oben diskutierten Gründen keine stabilen Randbedingungen eingehalten werden können. Deshalb müssen die Ionen an der Schichtkante die durch das Bohm-Kriterium erfüllte Mindestgeschwindigkeit innehaben.

#### 4.1.2 Verallgemeinertes Bohm-Kriterium

Alle im letzten Abschnitt getroffenen Aussagen beruhen, neben der Homogenität in den verbleibenden beiden Raumrichtungen, auf der stark vereinfachten Annahme kalter Ionen ( $T_i = 0$ ). Diese strenge Einschränkung soll nun durch Einführen einer Ionengeschwindigkeitsverteilung aufgehoben werden. Für eine genauere Betrachtung bezieht man sich auf eine korrespondierende Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(v,\xi)$  in Abhängigkeit von der Stelle  $\xi < 0$  in der Schicht (Abb. (4.2)). Im folgenden Abschnitt steht v für die Ionengeschwindigkeit in  $\xi$ -Richtung oder allgemeiner in der Richtung senkrecht zur Wand. Geht man weiterhin von einer perfekt absorbierenden Wand aus, so gibt es keine Ionen mit negativer Geschwindigkeit

$$f(v,\xi) = 0 \; ; v < 0 \; ; \forall \xi < 0 \tag{4.26}$$

Insbesondere haben direkt hinter der Schichtkante ( $\xi \rightarrow -\infty$ ) die langsamsten Ionen die Geschwindigkeit v = 0. Für eine Stelle  $\xi$  in der Schicht folgt damit die minimal mögliche Geschwindigkeit der Teilchen aus der Energieerhaltung (4.11)

$$v_{min}(\xi) := \sqrt{\frac{-2e \ \phi(\xi)}{m_i}} \longrightarrow 0 \ ; (\xi \xrightarrow{(4.10)} -\infty)$$
(4.27)

Dabei wurde eine reibungsfreie Schicht ohne Ionenquellen postuliert. Die Teilchendichte  $n_i(x)$  ist demzufolge

$$n_i(\xi) = \int_{v_{min}(\xi)}^{\infty} f(v,\xi) \, dv \, ; \forall \xi < 0 \tag{4.28}$$

Wieder aus der Energieerhaltung (4.11) gewinnt man folgende Variablensubstitution für das Integral (4.28)

$$v_{0} = \sqrt{v^{2} - v_{min}^{2}} \quad \Leftrightarrow \quad v = \sqrt{v_{0}^{2} + v_{min}^{2}}$$
$$\Rightarrow \frac{dv}{dv_{0}} = \frac{v_{0}}{\sqrt{v_{0}^{2} + v_{min}^{2}}} \tag{4.29}$$

Beachte, dass  $v_0$  wieder der Ionengeschwindigkeit an der Schichtkante entspricht. Diese ist nun aber, im Unterschied zum letzten Abschnitt gemäß einer Wahrscheinlichkeitsdichte f verteilt. Damit wird (4.28) zu

$$n_i(\xi) = \int_0^\infty f(\sqrt{v_0^2 + v_{min}^2}, \xi) \cdot \frac{v_0}{\sqrt{v_0^2 + v_{min}^2}} \, dv_0 \tag{4.30}$$

Mit (4.27) ist dieser Ausdruck identisch zu Gleichung 2 in [74]. Identifiziert man mit  $v_0$  die Geschwindigkeit der Ionen an der Schichtkante, so ist die gewonnene Identität (4.30) analog zu der in [75] (§3) beziehungsweise [76] (Glg. 1). Setzt man nun (4.30) sowie die beibehaltenen Elektronendichte (4.8) in die Poisson-Gleichung (4.7) ein, so erhält man

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0} \left( \int_0^\infty f(\sqrt{v_0^2 + v_{min}^2}, \xi) \cdot \frac{v_0}{\sqrt{v_0^2 + v_{min}^2}} \, dv_0 - n_0 \, \exp\left\{\frac{e\phi}{T_e}\right\} \right) \tag{4.31}$$

Bei Annäherung an die Schichtkante ( $\xi \rightarrow -\infty$ ) gilt  $v_{min} \rightarrow 0$  (4.27), womit sich neben (4.15) folgende Entwicklung nutzen lässt

$$f(\sqrt{v_0^2 + v_{min}^2}, \xi) \cdot \frac{v_0}{\sqrt{v_0^2 + v_{min}^2}} \doteq f_{se}(v_0) \cdot \left(1 - \frac{1}{2} \frac{v_{min}^2}{v_0^2}\right)$$
(4.32)

Hierbei ist  $f_{se}$  die Wahrscheinlichkeitsdichte der Ionengeschwindigkeiten an der Schichtkante. Es ergibt sich

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0} \left( \int_0^\infty f_{se}(v_0) \cdot \left( 1 - \frac{1}{2} \frac{v_{min}^2}{v_0^2} \right) dv_0 - n_0 \left( 1 + \frac{e\phi}{T_e} \right) \right)$$

$$= -\frac{e}{\varepsilon_0} \left( n_0 - n_0 \frac{1}{2} v_{min}^2 \cdot \langle v_0^{-2} \rangle - n_0 - n_0 \frac{e\phi}{T_e} \right)$$

$$\stackrel{(4.27)}{=} \frac{e^2 \phi n_0}{\varepsilon_0} \left( \frac{1}{T_e} - \frac{1}{m_i} \cdot \langle v_0^{-2} \rangle \right)$$
(4.33)

Mit der obligatorischen Forderung nach nicht oszillierenden Lösungen analog zu (4.18)

$$\left(\frac{1}{T_e} - \frac{1}{m_i} \cdot \langle v_0^{-2} \rangle\right) \ge 0 \tag{4.34}$$

folgt eine verallgemeinerte Form des Bohm-Kriteriums

$$\langle v_0^{-2} \rangle \le \frac{m_i}{T_e} \tag{4.35}$$

verbreiteter ist die Schreibweise

$$\int_{0}^{\infty} \frac{f_{se}(v_0)}{v_0^2} \, dv_0 \le \frac{m_i}{T_e} \tag{4.36}$$

und die Bezeichnung *kinetisches Bohm-Kriterium* [66]. Man sieht, wie aus (4.36) mittels der speziellen Geschwindigkeitsverteilung  $f_{se}(v_0) = \delta(v_0 - v_{se})$  wieder das original Bohm-Kriterium (4.19) für kalte Ionen, welche unisono mit  $v_{se}$ , die Schichtkante passieren, wird. Weiterhin bleibt auch der Inhalt der Diskussion des letzten Abschnitts erhalten. Eine Verteilung, welche niedrigen Geschwindigkeiten zu stark wichtet, wird das kinetische Bohm-Kriterium nicht erfüllen. Der physikalische Grund ist auch hier, dass die Dichte der langsamen Ionen an der Schichtkante schneller sinkt. Deshalb würde wieder ab dem Grenzwert der Bohm-Bedingung die Ionendichte schneller als die Elektronendichte sinken und es würde sich ein oszillierendes Verhalten an der Schichtkante einstellen. Eine entsprechende Diskussion findet in Abschnitt II in [74] statt. Das mit (4.36) begründete Kriterium soll in dieser Arbeit als Vergleichsreferenz für mit den Simulationen erzielte Ergebnisse dienen (siehe Abschnitt 5.2.1). Für weiterführende Diskussionen oder Erweiterungen bezüglich (4.36) können [76] beziehungsweise [66] (Abschnitt 3) konsultiert werden.

#### 4.1.3 Vorschichtbedingungen

Betrachtet man das ursprüngliche Bohm-Kriterium (4.19), so lässt sich für  $T_i = T_e$  folgende Abschätzung in den Raum stellen

$$v_{therm} = \sqrt{\frac{T_i}{m_i}} < \sqrt{\frac{2 T_i}{m_i}} =: c \text{ (für } T_i \neq 0)$$

$$(4.37)$$

Das heißt, selbst für  $T_i = T_e$  ist die thermische Bewegung der Ionen nicht ausreichend, um sie auf die vom Bohm-Kriterium geforderte Mindestgeschwindigkeit c zu beschleunigen. Man schließt daraus [69, 73], dass die Abschirmung der Wand durch die positive Raumladung der Schicht nicht perfekt sein kann. Stattdessen muss ein im Verhältnis zum Potentialabfall in der Schicht selbst schwaches elektrisches Feld in den vor der Schicht gelegenen, quasineutralen Plasmabereich hindurchdringen und die Ionen beschleunigen. Für diesen "Beschleunigungsbereich" hat sich heute der Begriff der Vorschicht (presheath) etabliert (vgl. Skizze (4.1)).

Bei einer dezidierten Aufteilung des Raumes in Schicht und Vorschicht steht man nun also vor dem Problem, dass die Randbedingungen bei Annäherung an die Schichtkante aus dem Schichtbereich (4.10) unvereinbar mit dem nicht verschwindenden Potentialgradienten in der Vorschicht scheinen. Riemann [66, 69, 77] begegnet diesem Problem durch eine Multiskalentheorie. Hierfür führt man für die mathematische Behandlung der Vorschicht die sogenannte *Vorschichtskala (presheath-scale)* 

$$x = \mathcal{O}(L) \tag{4.38}$$

ein (im Unterschied zur Schichtskala (4.9)  $\xi = O(\lambda_D)$ ). Dabei ist L die typische Systemausdehnung. Etwa ist  $L \approx \langle l \rangle$  der mittleren freien Weglänge der Ionen. Streng genommen hat die Trennung von Schicht- (4.9) und Vorschichtskala (4.38) nur im Grenzfall

$$\frac{\lambda_D}{L} \longrightarrow 0 \tag{4.39}$$

Gültigkeit. Die Randbedingung auf der Vorschichtskala, also bei Annäherung an die Schichtkante von links, legt man nun wie folgt fest

$$\phi \longrightarrow 0; (x \to 0) \tag{4.40}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \longrightarrow -\infty; (x \to 0)$$
 (4.41)

(Beachte, dass bei einem Wechsel von Schicht- (Abschnitte 4.1.1 und 4.1.2) zu Vorschichtskala der geometrische Ort der Schicht von  $\xi \to -\infty$  zu jetzt  $x \to 0$  wechselt). Die physikalische Aussage, welche man hier in Formeln artikuliert, ist prinzipiell wie folgt zu greifen. Der Potentialgradient vor der Schicht ist um Größenordnungen flacher als der in der Schicht. Das heißt, auf der Skala der Schicht ist er praktisch vernachlässigbar. Nur auf einer größeren Skala, der Vorschichtskala, kommt es zu einer signifikanten Potentialveränderung. Dafür ist der Potentialabfall in der Schicht auf dieser gröberen Auflösung unendlich steil und manifestiert sich durch die formale Singularität (4.41). Zur Illustration siehe Abbildung 4 in [66] oder Abbildung 1 in [69]. Die Ionenbeschleunigung bis zur Schichtkante ist demnach, ähnlich wie die Streuung [7], ein gradueller Effekt, der nur über die lange Skala L kumulativ zum Tragen kommt.

Eine wichtige Beschränkung für die Ionenbeschleunigung in der Vorschicht kommt aus der dort geforderten Quasineutralität ([66] Abschnitt 2.3). Für die Dichte kalter Ionen gilt zusammen mit dem Strom in *x*-Richtung ( $\perp$  zur Wand)

$$n_i = \frac{j_i}{v_i} \tag{4.42}$$

Aus der auf der Vorschichtskala geforderten Quasineutralität folgt zum Einen

$$n_i = n_e \tag{4.43}$$

zum Anderen aber auch

$$\frac{dn_i}{dx} = \frac{dn_e}{dx} \tag{4.44}$$

Daraus wird mittels (4.42) und (4.8) (Beachte, dass auf der Vorschichtskala die Elektronendichte ebenfalls mit dem Boltzmann-Faktor abnimmt)

$$\frac{1}{n_e v_i} \frac{dj_i}{dx} - \frac{1}{n_e} j_i \frac{1}{v_i^2} \frac{dv_i}{dx} = \frac{e}{T_e} \frac{d\phi}{dx}$$

$$\frac{1}{j_i} \frac{dj_i}{dx} - \frac{1}{v_i} \frac{dv_i}{dx} = \frac{e}{T_e} \frac{d\phi}{dx}$$

$$\frac{1}{j_i} \frac{dj_i}{dx} = \frac{e}{T_e} \frac{d\phi}{dx} + \frac{1}{2 v_i^2} \frac{dv_i^2}{dx}$$
(4.45)

Geht man davon aus, dass das Bohm-Kriterium (4.19) noch nicht erfüllt ist, so gilt

$$\frac{1}{v_i^2} > \frac{m_i}{T_e} \tag{4.46}$$

Damit lässt sich aus (4.45) folgende Ungleichung gewinnen

$$\frac{1}{j_i}\frac{dj_i}{dx} > \frac{e}{T_e}\frac{d\phi}{dx} + \frac{m_i}{2T_e}\frac{dv_i^2}{dx}$$

$$\tag{4.47}$$

was mit  $d\phi/dx < 0$  zu

$$\frac{1}{j_i}\frac{dj_i}{dx} > \frac{1}{T_e} \left(\frac{dE_{kin}}{dx} - \left|\frac{d(e\phi)}{dx}\right|\right)$$
(4.48)

wird. Damit hat man eine Relation, welche die Formulierung für Bedingungen in einer quasineutralen Vorschicht zulässt. Da die Differenz zwischen Gewinn an kinetischer Energie in x-Richtung und Verlust an potentieller Energie maximal 0 ist, lässt sich für die rechte Seite in (4.48) noch eine zweite Bedingung formulieren

$$0 \ge \frac{1}{T_e} \left( \frac{dE_{kin}}{dx} - \left| \frac{d(e\phi)}{dx} \right| \right)$$
(4.49)

Aus dem Zusammenspiel aus den Gleichungen (4.48) und (4.49) leitet man nun die folgenden *Vorschichtbedingungen* 1.-3. [66, 77] ab

- 1.  $\frac{dj_i}{dx} > 0 \land \frac{dE_{kin}}{dx} = \left| \frac{d(e\phi)}{dx} \right| \rightarrow$  der Ionenfluss nimmt geometrisch bedingt, etwa beim Zulaufen auf eine gekrümmte Wand, zu: *Geometrische Vorschicht*.
- 2.  $\frac{dj_i}{dx} > 0 \land \frac{dE_{kin}}{dx} < \left| \frac{d(e\phi)}{dx} \right| \rightarrow$  beim Zulaufen auf die Wand entstehen durch Ionisation stets weitere Ionen: *Ionisationsvorschicht*
- 3.  $\frac{dj_i}{dx} < 0 \land \frac{dE_{kin}}{dx} < \left| \frac{d(e\phi)}{dx} \right| \rightarrow \text{Reibung} : Stößige Vorschicht$
- Die kinetische Energie senkrecht zur Wand (in x-Richtung) wird in kinetische Energie in eine Richtung parallel zur Wand umgewandelt. Dies kann etwa durch einen Drift, wie den *Ē* × *B*-Drift, geschehen: Magnetische Vorschicht (siehe Abschnitt 5.3.1) [Nicht aus den Gleichungen (4.48) und (4.49) ableitbar!]

Zur physikalischen Anschauung sei hier noch folgendes gesagt. Das Bohm-Kriterium gibt offensichtlich nur eine untere Grenze für die Geschwindigkeit an der Schichtkante vor. Die hier ausgeführten Vorschichtbedingungen legen nun fest, dass die dafür benötigte, vorangegangene Beschleunigung nach oben ebenfalls begrenzt sein muss. Bei einer zu starken Beschleunigung könnte der "Ionenstrahl" in der Vorschicht zu stark ausgedünnt werden, was es dem System unmöglich machen würde, in diesem Bereich die Quasineutralität aufrecht zu erhalten.

#### 4.2 Simulationsaufbau

Um das angesprochene Wandteilchenkonzept 4.0.1 zu überprüfen und physikalisch neue Einsichten in das Schichtproblem zu erlangen, wird folgender Simulationsaufbau gewählt. Das eigentliche Simulationsgebiet ist eine 3d Box mit den räumlichen Ausdehnungen  $l_i$ ; i = x, y, z. Das Festlegen der Raumrichtungen geschieht dabei, wie in Figur (4.3) gezeigt, durch das Fixieren der vorderen, unteren Boxecke im Koordinatenursprung.

An der Fläche x = 0 werden thermische Ionen und Elektronen in das Simulationsgebiet gegeben. Geht man davon aus, dass sich im Bereich x < 0 ein thermalisiertes Plasma befindet, müssen die Teilchengeschwindigkeiten den Wahrscheinlichkeitsdichten

$$f_s(v_x) = \frac{m_s}{T_s} \cdot v_x \exp\left\{-\frac{m_s v_x^2}{2T_s}\right\} ; s = i, e ; v_x \in \mathbb{R}^+$$

$$f_s(v_y) = f_s(v_z) = \mathcal{N}\left(0, \frac{T_s}{m_s}\right) \; ; s = i, e \tag{4.50}$$

folgend verteilt werden (vgl. auch Abb. (5.14) in Abschnitt 5.2.1.3). Dabei kennzeichnet  $\mathcal{N}$  die Normalverteilung.  $T_s$  ist hierbei ein mathematischer Eingabeparameter der die Quellverteilung charakterisiert. Er wird im Folgenden als *Quelltemperatur* bezeichnet (vgl. hierzu auch die Bemerkungen am Ende von Abschnitt 4.3). Mit den gewählten Verteilungen garantiert man, dass die Teilchen eine mittlere, kinetische Energie von  $\langle E \rangle = 2T_s$  haben (vgl. dazu [3] Abschnitt 2.2, Glg. (2.30)). Stehen die Geschwindigkeiten fest, so werden neue Simulationsteilchen an den Stellen

$$\vec{x}_P := (v_x \cdot \Delta t \; r_1; l_y r_2; l_z r_3) \tag{4.51}$$

generiert. Dabei ist  $\Delta t$  die Zeitschrittweite des Integrators und  $r_i$ ; i = 1, 2, 3 gleichverteilte Zufallszahlen  $r_i \in \mathcal{U}(0, 1)$ ; i = 1, 2, 3. Obwohl die Teilchen mit strikt positiven Geschwindigkeiten in x-Richtung ( $v_x > 0$ ) eingeschossen werden, können sie aufgrund von Stößen oder anderer kollektiver Effekte, Geschwindigkeiten mit  $v_x < 0$  annehmen und dann das System bei x = 0 verlassen. Geschieht dies, so werden entsprechende Teilchen entfernt und ein neues Teilchen der eben beschriebenen Prozedur folgend erzeugt. Dies entspricht dem "*Refluxing*" wie es auch in den Arbeiten [71, 72] zum Einsatz kam und in [57] zusammengefasst wird. Wie in [72] betont wird, befähigt diese Art des Wiedereinschießens von Teilchen das System auch ohne Stöße einen Gleichgewichtszustand zu erreichen.



Abbildung 4.3: Schematischer Aufbau der Simulation

Auf der Ebene  $x = l_x$  werden die erläuterten Wandteilchen 4.0.1 verteilt. Für die hier gewählten Simulationsszenarios (siehe Abschnitt 4.3) wurde ihre Anzahl  $N_{Wand}$  stets so gewählt, dass für den Wandteilchenabstand (4.1)

$$\frac{d_{sp}^{(z)}}{\lambda_D} = \frac{d_{sp}^{(y)}}{\lambda_D} \approx 0,01 \tag{4.52}$$

gilt. Damit ist die geforderte Bedingung  $d_{sp} \leq \lambda_D$  für alle Modellszenarios erfüllt.

Trifft nun ein Ion oder Elektron die Wand bei  $x = l_x$ , so wird seine Ladung in gleichen Teilen auf die Wandteilchen verteilt. Das Teilchen selber wird am Ende des aktuellen Zeitschrittes aus der Simulation entfernt. Damit das System stets die Möglichkeit hat, im Hauptplasmabereich vor der Schicht seine Quasineutralität zu halten, werden alle zwei Zeitschritte die nach Wandtreffern gelöschten Teilchen gemäß der oben erläuterten Quellprozedur ersetzt. Der Grund, warum dies alle zwei und nicht jeden Zeitschritt geschieht, ist der, dass man so eine gewisse Teilchenstauung im Quellbereich vermeiden kann. Eine solche könnte nicht mehr aufzulösende Teilchenabstände bedingen und den Code somit destabilisieren. Mit der stets beachteten Bedingung (3.43) gilt jedoch

$$\omega_p \cdot \Delta t \leqq 0,6 \tag{4.53}$$

Damit ist garantiert, dass eventuell generierte Ladungsungleichgewichte nie lange genug existieren würden, um sich zu selbstgenerierten Plasmaschwingungen aufzuschaukeln.

Zu Beginn des ersten Zeitschrittes werden alle Simulationsteilchen auf einmal generiert. Dies führt dazu, dass das System erst nach einer kurzen Einschwingphase (vgl. Abb. (4.4) und (4.5)) in sein Gleichgewicht findet. Danach ist der Fluss auf die Wand ambipolar, was gleichzeitig mit dem eben geschilderten Sachverhalt bedeutet, dass ein konstanter, thermalisierter Quellenteilchenstrom in die Box gegeben wird. Diese Vorgehensweise scheint natürlicher als der Quelle einen konstanten Fluss vorzugeben, wie das etwa in [72] geschieht. Erlaubt sie doch dem System, sich unabhängig selbst zu justieren, und die gegebenenfalls durch die Boxlänge oder Temperaturen beeinflusste Gleichgewichtsbedingung eigenständig einzustellen.

Die beiden verbleibenden Raumrichtungen y und z werden gemäß dem in [78] vorgestellten Konzept als periodische Ränder an den Ebenen  $z = 0 \land z = l_z$  sowie  $y = 0 \land y = l_y$  gewählt (Abb. (4.3)). Damit ist das System in die besagten Richtungen als unendlich ausgedehnt zu betrachten, was zur Folge hat, dass die Ergebnisse als quasi 1d einzustufen sind. Zusammen mit den periodischen Rändern sorgt nun das gleichmäßige Verteilen von Ladungen, welche die Wand treffen, auf die Wandteilchen, dafür, dass die Wand eine Äquipotentialfläche wird. Da es jedoch keinen weiteren, exklusiven Mechanismus im Tree-Code gibt, der dies erzwingt, muss dieses separiert getestet werde, was in Abschnitt 4.5 geschieht.

Zum Schluss ist noch anzuführen, dass ein Großteil der Simulationen für dünne Plasmen durchgeführt werden. Abbildung (3.6) aus Abschnitt 3.2 folgend wäre damit die restriktivste Zeitskala für die Schrittweite  $\Delta t$  die Elektronengyrationsfrequenz. Um dennoch in tragbaren Zeiten zu belastbaren Ergebnissen zu kommen, werden die Elektronen, bei Simulationen mit magnetischen Feld  $\vec{B} \neq 0$ , in Führungszentrumsnäherung integriert. Dazu wird der neue, in 3.4.1 vorgestellte, Führungszentrumsintegrator instrumentalisiert. Da für die Ionen die volle Gyrokinetik aufgelöst wird, ist darauf zu achten, dass  $l_{y,z} > 2\rho_g$ . Die zum B-Feld senkrechten Dimensionen müssen also größer sein, als der Ionengyrationsradius, welcher für ein zur Wand senkrechtes B-Feld mit

$$\rho_g := \frac{v_\perp}{\omega_c} \approx \frac{\sqrt{\frac{T_i}{m_i}}}{\frac{q_i B}{m_i}} \tag{4.54}$$

abgeschätzt wird.

# 4.3 Simulationsszenarios

Aus schreibökonomischen Gründen und der Übersichtlichkeit Rechnung tragend werden an dieser Stelle die verschiedenen Einstellungen der einzelnen Simulationsszenarios zusammengetragen. In den Paragraphen der folgenden Kapitel, in denen die Ergebnisse der Simulationen zur Diskussion stehen, werden die einzelnen Grundeinstellungen dann nur noch über die Nummerierung (Szenario I etc.) angesprochen. Bei den unten stehenden, physikalischen Werten sind stets idealisierte Gleichgewichtswerte angenommen. Das heißt beispielsweise, dass bei der Berechnung der Plasmafrequenz  $\omega_p$  davon ausgegangen wird, dass sich über die Box eine homogene Dichte mit dem in der Tabelle aufgeführten Wert  $n_i = n_e$  einstellt. Dass dies nicht völlig richtig ist, kann Abbildung (4.20) entnommen werden. Gleiches gilt für die aufgelistete Debye-Länge. Auch entsprechen die angegebenen Temperaturen den Quellenwerten, wie sie in (4.50) Eingang finden. Der aufgeführte *Superteilchenfaktor*  $f_{sp}$  ist dabei der in Abschnitt 3.5 definierte Skalierungsfaktor, mit dem die Massen und Ladungen der Super- oder Simulationsteilchen zahl  $N_s$ 

$$f_{sp} := \frac{n_s \cdot V_{sim}}{N_s} ; s = i, e \tag{4.55}$$

Die Auflösung pro *Debye-Kugel* A erhält man mit der Annahme einer homogenen Teilchendichte.

$$\mathcal{A} := \frac{N_s}{\frac{V_{sim}}{\lambda_s^3}}; s = i, e \tag{4.56}$$

Diese Größe sollte bei Tree-Codes weniger kritisch sein als etwa bei PIC-Codes, da PEPC in jedem Zeitschritt sein tatsächliches Rechengebiet (vgl. schwarze Wurzelbox in Abb. (2.2) aus Paragraph 2.2.1) selbst definiert. Aus diesem Grund treten Artefakte wie etwa eine numerische Heizung nicht auf (vgl. auch Abschnitt 6.2). Dennoch kann  $\mathcal{A}$  anderweitig entscheidenden Einfluss auf Resultate nehmen und wird deshalb gesondert in Paragraph 6.2 untersucht.

Der definierte Winkel  $\alpha$  beschreibt die relative Lage zwischen Oberflächennormale und dem konstanten B-Feld (siehe Abb. (5.27) in Abschnitt 5.3). Genauer wurde bei Winkeln  $\alpha \neq 0$   $\vec{B}$  mathematisch positiv um die z-Achse gegenüber der Oberflächennormale gedreht. Obwohl ein B-Feld bei senkrechtem Einfall ( $\alpha = 0^{\circ}$ ) keinen Einfluss auf die beobachtbaren Phänomene hat, ist in Vorwegnahme des Paragraphen 5.3.1 teilweise ein magnetisches Feld wirksam. Aus diesem Grund wurden auch, wie erwähnt, die Elektronen immer in Führungszentrumsnäherung behandelt.

Szenario	l	I a/b/c		
Physikalische Dichte	$n_i = n_e = 10^{17} \ {\rm m}^{-3}$	$n_i = n_e = 10^{17} \ {\rm m}^{-3}$		
Ionentemperatur	$T_i = 80 \text{ eV}$	$T_i = 80 \text{ eV}$		
Elektronentemperatur	$T_e = 80 \text{ eV}$	$T_e = 80 \text{ eV}$		
Elektronen Debye-Länge	$\lambda_D pprox 0,00021 \text{ m}$	$\lambda_D pprox 0,00021 \text{ m}$		
Massenverhältnis	$m_i/m_e = 1836$	$m_i/m_e = 1836$		
B-Feld	$B = 2 \mathrm{T}$	$B = 2 \mathrm{T}$		
Winkel zur Oberflächennormale	$\alpha \geqq 0^{\circ}$	$\alpha = 0^{\circ}$		
Ausdehnung <i>x</i> -Richtung	$l_x \approx 0,01682 \text{ m} (\approx 80 \lambda_D)$	$l_x = 20/40/60\lambda_D$		
Ausdehnung $y, z$ -Richtung	$l_y = l_z \approx 0,001 \text{ m} (\approx 2,2\rho_g)$	$l_y = l_z \approx 0,001 \text{ m} (\approx 2,2\rho_g)$		
Simulationsvolumen	$V_{sim}\approx 1,68\cdot 10^{-8}~{\rm m}^3$	$V_{sim} \approx 0,42/0,84/1,3\cdot 10^{-8} \text{ m}^3$		
Anzahl Simulationsteilchen	$N_i = N_e = 10^6$	$N_i = N_e = 10^6$		
Auflösung pro Teilchensorte	$\mathcal{A} \approx 550 \ 1/\lambda_D^3$	${\cal A} pprox 2200/1100/740 \ ^1/\lambda_D^3$		
Anzahl der Wandteilchen	$N_{Wand} = 250000$	$N_{Wand} = 250000$		
Abstand zwischen Wandteilchen	$d_{sp}^{(z)} = d_{sp}^{(y)} \approx 0,0095 \lambda_D$	$d_{sp}^{(z)} = d_{sp}^{(y)} \approx 0,0095 \lambda_D$		
Superteilchenfaktor	$f_{sp} \approx 1682$	$f_{sp} \approx 420/840/1260$		
Zeitauflösung	$\omega_p \Delta t \approx 0,17$	$\omega_p \Delta t \approx 0,18$		
Konvergenz nach	$K \approx 24000$ Schritten	$K \approx 6000/12000/18000$ Schritten		

Tabelle 4.1: Simulationsszenarios

		1
Szenario	II a/b/c	III
Physikalische Dichte	$n_i = n_e = 10^{19} \text{ m}^{-3}$	$n_i = n_e = 10^{18} \text{ m}^{-3}$
Ionentemperatur	$T_i = 15/20/30 \; {\rm eV}$	$T_i = 1 \text{ eV}$
Elektronentemperatur	$T_e = 15/20/30 \; \mathrm{eV}$	$T_e = 1 \text{ eV}$
Elektronen Debye-Länge	$\lambda_D pprox 0, 9/1, 1/1, 3 \cdot 10^{-5} \text{ m}$	$\lambda_D \approx 7, 4 \cdot 10^{-6} \text{ m}$
Massenverhältnis	$m_i/m_e = 1836$	$m_i/m_e = 1836$
B-Feld	-	-
Winkel zur Oberflächennormale	-	-
Ausdehnung <i>x</i> -Richtung	$l_x = 80\lambda_D$	$l_x \approx 0,00595 \text{ m} (\approx 800 \lambda_D)$
Ausdehnung y, z-Richtung	$l_y = l_z \approx 0,00004 \text{ m}$	$l_y = l_z \approx 0,00002 \text{ m}$
Simulationsvolumen	$V_{sim} \approx 1, 2/1, 3/1, 6 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3$	$V_{sim} \approx 2, 4 \cdot 10^{-12} \text{ m}^3$
Anzahl Simulationsteilchen	$N_i = N_e = 10^6$	$N_i = N_e = 10^6$
Auflösung pro Teilchensorte	${\cal A} pprox 458/863/1295 \ ^1/\lambda_D^3$	$\mathcal{A} \approx 170 \ ^{1}\!/\lambda_{D}^{3}$
Anzahl der Wandteilchen	$N_{Wand} = 211600$	$N_{Wand} = 78400$
Abstand zwischen Wandteilchen	$d_{sp}^{(z)} = d_{sp}^{(y)} \approx 0,0096/0,0083/0,0067 \lambda_D$	$d_{sp}^{(z)} = d_{sp}^{(y)} \approx 0,0096 \lambda_D$
Superteilchenfaktor	$f_{sp} = 11, 7/13, 5/16, 5$	$f_{sp} = 2, 4$
Zeitauflösung	$\omega_p \Delta t \approx 0,18$	$\omega_p \Delta t \approx 0,56$
Konvergenz nach	K = 30000 Schritten	K = 60000 Schritten

Tabelle 4.2: Simulationsszenarios

Die hier gezeigten Simulationen wurden ausnahmslos auf dem Fusions-Supercomputer HPC-FF [16] durchgeführt. Pro Simulationslauf wurden dabei 256 beziehungsweise 512 Prozessoren parallel genutzt.

Generell sei hier noch einmal wiederholt, dass es im Tree-Code keinen externen Mechanismus gibt, welcher das Potential an einem festgelegten Raumpunkt fixiert. Das heißt, die Werte der

Szenario	IV a/b	
Physikalische Dichte	$n_i = n_e = 10^{17} \text{ m}^{-3}$	
Ionentemperatur	$T_i = 10 \text{ eV}$	
Elektronentemperatur	$T_e = 5/10 \text{ eV}$	
Elektronen Debye-Länge	$\lambda_D pprox 5, 3/7, 4 \cdot 10^{-5} \mathrm{~m}$	
Massenverhältnis	$m_i/m_e = 1836$	
B-Feld	-	
Winkel zur Oberflächennormale	-	
Ausdehnung x-Richtung	$l_x = 80\lambda_D$	
Ausdehnung $y, z$ -Richtung	$l_y = l_z \approx 0,0001 \text{ m}$	
Simulationsvolumen	$V_{sim} \approx 4, 2/5.9 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3$	
Anzahl Simulationsteilchen	$N_i = N_e = 2 \cdot 10^5$	
Auflösung pro Teilchensorte	$\mathcal{A}pprox 690/1381 \ ^1/\lambda_D^3$	
Anzahl der Wandteilchen	$N_{Wand} = 62500$	
Abstand zwischen Wandteilchen	$d_{sp}^{(z)} = d_{sp}^{(y)} \approx 0,007/0,005 \lambda_D$	
Superteilchenfaktor	$f_{sp} = 21, 0/29, 7$	
Zeitauflösung	$\omega_p \Delta t \approx 0,18$	
Konvergenz nach	K = 24000 Schritten	

 Tabelle 4.3: Simulationsszenarios

stets berechneten Potentiale sind jeweils mit der Freiheit einer Integrationskonstante zu interpretieren. Diese wird an verschiedenen Stellen in dieser Arbeit ausgenutzt und Potentialwerte entsprechend verschoben. Allgemein, werden Potentiale  $\phi$  in dimensionslosen Einheiten angegeben

$$\phi := \frac{e\phi \ [eV]}{T_e \ [eV]} \tag{4.57}$$

Dabei ist, soweit nichts anderes bemerkt,  $T_e$  die Elektronentemperatur der Quelle, wie sie in den Tabellen (4.1), (4.2) oder (4.3) aufgelistet ist. Jedoch ist zu beachten, dass die Quellentemperatur, analog der Diskussion in Kapitel 25 aus Stangeby [3], keine physikalisch messbare Größe darstellt, sondern als mathematische Konstante gesehen werden muss, welche die Quelle beschreibt.

*Bemerkung:* Im Folgenden werden alle Szenarios mit der beschriebenen Quelle (4.50) ausgewertet. Ausschließlich in Abschnitt 5.2.1.3 werden andere Quellverteilungen definiert und eingesetzt. Dies geschieht um zu belegen, dass das Wandteilchenkonzept mit den entsprechenden Quelltermen die existierenden analytischen Lösungen [2, 79] reproduziert.

#### 4.4 Evolution und Konvergenz des Systems

Um physikalische Fakten aus dem Modell auszulesen, muss definiert werden, wann das System stationär ist. Eine mögliche Abschätzung, ab welchem Zeitpunkt dies der Fall ist, liefert Takizuka et. al [21]. Die Anzahl der Zeitschritte  $K_T$ , die für die Stationarität benötigt wird, ist demnach

$$K_T = \frac{2 l_x}{v_{ch} \Delta t} \tag{4.58}$$

Dabei ist  $v_{ch}$  eine charakteristische Geschwindigkeit der Ionen. In [21] wird beispielsweise  $v_{ch}$  als die isotherme Ionenschallgeschwindigkeit

$$v_{ch} = c_s := \sqrt{\frac{T_i + T_e}{m_i}} \tag{4.59}$$

gewählt. Für die hier gezeigten Ergebnisse wird

$$v_{ch} = \bar{v} := \sqrt{\frac{8 T_i}{\pi m_i}} \tag{4.60}$$

eingesetzt. Es wird klar, dass, wenn man das Verhältnis  $m_i/m_e$  verändert, indem  $m_i$  künstlich verkleinert wird,  $v_{ch}$  zu- und damit  $K_T$  abnimmt. Dies ist eine bewährte Vorgehensweise in PIC-Codes ([57] Tabelle 1 und [72] Tabelle 2) sowie der Moleküldynamik generell, um die Konvergenz von Systemen zu beschleunigen. Sie beruht physikalisch darauf, dass leichtere Teilchen qualitativ dieselbe Dynamik aufweisen wie schwere, diese jedoch auf kürzeren Zeitskalen abläuft. An gegebenen Stellen soll deshalb aus denselben Gründen ein abgeändertes Massenverhältnis zum Einsatz kommen (Abb. (4.25) und (4.26)).

Die Motivation für die ad hoc Abschätzung (4.58) beruht auf der Annahme, dass der erste Ionenschwarm zunächst benötigt wird, um die von den schnelleren Elektronen erzeugte negative Wandladung in Teilen auszugleichen und die Abschirmung herzustellen. Erst der durch die Quelle generierte zweite Ionenschwarm trägt dann zu dem erwarteten ambipolaren Strom bei. Oft wird deshalb in der Literatur [21] eine charakteristische Frequenz (*Bounce Frequency*) für das einmalige durchfliegen des Simulationsgebiets durch ein Ionenensemble definiert

$$\nu_b := \frac{\nu_{ch}}{l_x} \tag{4.61}$$

Das Doppelte dieser Zeitskala  $\tau_b := 1/\nu_b$  räumt man dem System dann für dessen Konvergenz ein. Für Szenario I ergibt sich nun

$$K_T \approx 24000 \left(\widehat{=} 2 \tau_b\right) \tag{4.62}$$

Da (4.58) jedoch nur auf einer a priori Annahme beruht und auch in der vergleichbaren Literatur keine genaueren Hinweise gefunden wurden, soll hier eine phänomenologische Untersuchung

von (4.58) erfolgen. Mit diesem Ziel betrachtet man zunächst (Abb. (4.4)) den Elektronen- als auch den Ionenfluss auf die Wand. Man sieht, dass zuerst die leichten Elektronen und dann zeitverzögert die Ionen die Wand treffen. Nach 24000 Zeitschritten ist der Fluss im Mittel ambipolar geworden.



Abbildung 4.4: Teilchenfluss auf die Wand (Szenario I)

Das heißt im Rahmen des statistischen Rauschens treffen genauso viele Elektronen wie Ionen die Wand. Gerade so, wie man es beim dynamischen Ausbilden einer Schicht erwartet [3]. Dass der Nettofluss wirklich ladungsneutral ist, sieht man auch an der Gesamtladung der Wand, dargestellt in Graph (4.5). Wie in Abschnitt 4.1 beschrieben, erreichen die mobileren Elektronen die Wand zuerst und laden diese zunächst stark negativ auf. Die danach auf die Wand hin beschleunigten Ionen neutralisieren einen Teil dieser zuvor deponierten Ladungen, bevor sich dann die besagte ambipolare Strömung einstellt, welche die Wandladung im Rahmen des erwähnten Teilchenrauschens stabil lässt.



Abbildung 4.5: Gesamtladung auf der Wand (Szenario I)

Anders als jedoch bei den analytischen Abschätzungen lässt sich bei der Tree-Code Simulation dieser Einschwingvorgang direkt visualisieren. Dazu zeigen die Abbildungen (4.6) und (4.7), wie zuerst die Elektronen (rot) den Ionen (blau) vorauseilen.



Abbildung 4.6: Simulationsbox nach 100-Zeitschritten mit vorausgeeilten Elektronen (rot). Ungeladene Teilchen sind Sonden- bzw. Wandteilchen (Szenario I, x-Achse in  $1/\lambda_D$ )



Abbildung 4.7: Simulationsbox nach 1000-Zeitschritten (Szenario I)



Abbildung 4.8: Simulationsbox nach 100- Abbildung 4.9: Simulationsbox nach 1000-Zeitschritten mit selbstkonsistentem Potential Zeitschritten mit selbstkonsistentem Potential an den Teilchenpositionen (Szenario I)

an den Teilchenpositionen (Szenario I)

Damit sieht man an der gewählten 3d Darstellung in echter Teilchenauflösung, was in der Literatur abstrakt beschrieben wird. Das hohe Auflösungsvermögen des Tree-Codes ermöglicht also, diesen fundamentalen Vorgang in einem Plasma eins zu eins zu beobachten und zu studieren. Auch lässt sich zeigen, wie der Potentialgradient in 3d mit der Zeit kleiner wird und somit die beschleunigende Kraft auf die Ionen abnimmt (Abb. (4.8) und (4.9)). Weiterhin ist hier schon

zu sehen, wie durch das neue Wandteilchenkonzept während der Simulation die Ebene  $x = l_x$  als Äquipotentialfläche stabil gehalten wird (siehe dazu auch Abschnitt 4.5).

Bei einer genaueren Observation der Abbildungen (4.4) und (4.5) wird nun klar, dass der beschriebene Einschwingvorgang des Systems, welcher in dem erwarteten ambipolaren Strom endet, schon etwa bei 18000 < 24000 Zeitschritten ( $^{3}/_{2} \tau_{b}$ ) abgeschlossen ist. Die Notwendigkeit, die Simulation dennoch länger laufen zu lassen bevor Ergebnisse extrahiert werden, sieht man bei einem Studium der Ionenkinetik ein.

An den Phasenraumschnappschüssen (4.10) bis (4.15) ist zu sehen, dass das System die Ionen anfangs bis 6000 Zeitschritte ( $1/2 \tau_b$ ), zu stark beschleunigt. Nach dieser Phase stellt sich graduell ein stabiler Teilchenfluss ein. Jedoch zunächst (9000 – 12000 Zeitschritte) für langsamere Ionen. Der restliche Anteil ist noch zu schnell für einen stationären Zustand. Zu sehen ist dies durch die noch bestehende Lücke im Phasenraum im mittleren Geschwindigkeitsbereich (Abb. (4.11) und (4.14)). Diese ist auch an der Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Abb. (4.16)) zu erkennen.

Um dieses Verhalten des Systems zu verstehen, untersucht man zuerst die zeitliche Evolution des Potentials (Abb. (4.17)).

Es wird klar, dass der Potentialverlauf in der Vorschicht nur langsam mit der Zeit abflacht, also die elektrostatische Kraft auf die Ionen abnimmt. Der zuvor steilere Potentialgradient ist anfangs nach 3000 Zeitschritten ( $1/4 \tau_b$ ) durch die stark negativ geladene Wand zu erklären. Allerdings flacht das Potential in der Vorschicht zwischen 6000 - 12000 Zeitschritten weiter ab, obwohl die Wandladung in dieser Phase noch abnimmt (Abb. (4.5)). Der abflachende Potentialgradient muss also eine andere Ursache haben. Wie zuvor beschrieben, liegt es nahe, dass nachfließende Ionen sukzessive die Abschirmung der Wand aufbauen. Dies würde erklären, warum der Potentialabfall in der Vorschicht flacher wird, obwohl die Wandladung sinkt. Zusätzlich erklärt diese Interpretation auch, warum sich die Steigungen der Potentiale mit fortschreitender Simulationszeit vom linken Rand der Simulationsbox nach rechts hin angleichen und abflachen. Sie folgen damit der Ausbreitung der schnellen Ionenwolke, welcher man durch die Abbildungen (4.10) bis (4.11) folgen kann. Sobald dieser Ionenschwarm dann die Wand erreicht, baut sich die Abschirmung der Schicht sowie der ambipolare Strom auf. Nachfolgende Ionen werden dann nicht mehr übermäßig beschleunigt. Dies lässt sich an der Ionenkinetik durch die angesprochenen Phasenraumlücke beobachten, welche schrittweise in eine "Schulter" im hohen Geschwindigkeitsbereich der Verteilung (siehe grüne Verteilung in Abb. (4.16)) übergeht. Erst nach 24000 Zeitschritten ist diese dann letztendlich verschwunden. Im stationärem Zustand (nach 24000 Zeitschritten  $= 2 \tau_b$ ) ist dann in der Vorschicht nur noch ein schwacher Potentialgradient zu verzeichnen, welcher die Ionen auf das notwendige Bohm-Kriterium beschleunigt (Abschnitt 5.2).

Die Wandladung selbst hat dann fast nur noch Einfluss auf die Beschleunigung direkt vor der Wand. Die Auswirkung der Wandladung auf den Potentialabfall in der eigentlichen Schicht sieht man an Darstellung (4.18). Es ist deutlich zu sehen, dass die Potentialdifferenz in der Schicht nahezu exakt invers der Wandladung folgt (Abb. (4.5)). Wie die Werte für  $|e\Delta\phi|/T_e$  gewonnen werden, wird dabei in Abschnitt 4.7 genauestens erläutert. An dieser Stelle ist es wichtig zu bemerken, wie das System zunächst einen sehr hohen Wert von  $|e\Delta\phi|/T_e$  annimmt und sich nach etwa 18000 – 21000 Zeitschritten dem Referenzwert von Emmert et. al [2] (4.83) angenähert



Abbildung 4.10: Ionenphasenraum nach 3000 Abbildung 4.13: Ionenphasenraum nach 6000 *Zeitschritten* ( $1/4 \tau_b$ )



Zeitschritten ( $1/2 \tau_b$ )



Abbildung 4.11: Ionenphasenraum nach 9000 Abbildung 4.14: Ionenphasenraum nach *Zeitschritten*  $(3/4 \tau_b)$ 



Abbildung 4.12: Ionenphasenraum 18000 Zeitschritten ( $^{3}/_{2} \tau_{b}$ )



12000 Zeitschritten (1  $\tau_b$ )



nach Abbildung 4.15: Ionenphasenraum nach 24000 Zeitschritten (2  $\tau_b$ )



**Abbildung 4.16:** Evolution der Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I) im Bereich  $[0, 9-0, 95]l_x$ 



*Abbildung 4.17:* Evolution des Potentials (Szenario I) über dem Abstand x von der Wand bei  $x = 80 \lambda_D$ 

hat.

Abschließend ist also festzuhalten, dass für eine Untersuchung der Konvergenz die Ambipolarität als Indikator nicht ausreicht. Will man Aussagen über die Kinetik treffen, so muss die Simulation länger laufen gelassen werden. Ein Maß für die benötigte Zeit hierfür liefert  $\tau_b$ (*Bounce Time*), welche dem von Takizuka et. al ad hoc eingeführten Wert (4.58) zugrunde liegt. Jedoch zeigt sich gerade für dichtere Systeme, dass  $K_T$  zu groß ist. Nach den zuvor genannten Indikatoren (ambipolarer Fluss, geschlossener Phasenraum etc.) sind solche Systeme schon früher stationär.

Die in den folgenden Paragraphen diskutierten Ergebnisse sind demnach, falls nicht explizit anderweitig gekennzeichnet, Schnappschüsse nach K Zeitschritten, wie sie in den Tabellen (4.1) angegeben werden.



Abbildung 4.18: Evolution des Potentialabfalls in der Schicht (Szenario I) aufgetragen über der Zeit

## 4.5 Wandpotential

Wie in Abschnitt 4.0.1 angekündigt, muss extra getestet werden, ob die Wand eine Äquipotentialfläche ist. Dazu wird Szenario I ausgewertet. Man ermittelt zunächst das mittlere Potential

$$\langle \phi \rangle := \frac{1}{N_{Wand}} \sum_{i=1}^{N_{Wand}} \phi_i \approx -4,23$$
(4.63)

aller Wandteilchen und bestimmt mit diesem ein renormalisiertes Potential

$$\Phi := \frac{\phi}{\langle \phi \rangle} \tag{4.64}$$

Dessen Werte sind in Abbildung (4.19) aufgetragen.

Eine quantitative Untersuchung zeigt, dass die relative Abweichung  $\delta_{\phi}$  des Wandpotentials vom mittleren Potential

$$\delta_{\phi} := \frac{|\phi - \langle \phi \rangle|}{\langle \phi \rangle} \le 2,40\% \tag{4.65}$$

beträgt. Damit liegt die Abweichung unter dem Rauschen welches auch in der Bestimmung der Dichten oder der Temperatur des Hauptplasmas auftritt. Es sei noch erwähnt, dass Abbildung (4.19) zufolge die stärksten Abweichung offensichtlich in den Ecken der Box auftreten. Da diese Eckpunkte die Schnittstellen sind, an denen das entsprechende Modul die zusätzlichen Boxen für die periodischen Ränder anfügt [78], scheint die Vermutung naheliegend, dass es sich um ein numerisches Artefakt desselbigen handelt. Jedoch reichen die hier gezeigten Ergebnisse nicht aus, um dies zweifelsfrei zu klären. Für die folgenden Diskussionen ist festzuhalten, dass die



Abbildung 4.19: Renormalisiertes Potential  $\Phi$  auf der Wand (Szenario I)

Abweichung von einem konstanten Potential vernachlässigbar sind. Das Wandteilchenkonzept ist demzufolge dazu geeignet, eine stabile Äquipotentialfläche auf der Wand zu garantieren.

# 4.6 Teilchendichten

Es werden nun die ermittelten Teilchendichten untersucht. Dabei werden die Simulationsteilchenzahlen auf 1d Gitter mit Zellen der Grundflächen

$$d_x = \frac{l_x}{200} ; d_y = \frac{l_y}{200}$$
(4.66)

abgebildet. Die ermittelten Werte  $N_s$ ; s = i, e für die absoluten Teilchenzahlen werden dann mittels

$$n_s^{(x)} = \frac{N_s \cdot f_{sp}}{d_x \, l_z \, l_y} \, ; s = i, e \tag{4.67}$$

für die x-Richtung, beziehungsweise

$$n_s^{(y)} = \frac{N_s \cdot f_{sp}}{\left((56 - 24) \cdot \lambda_D\right) l_z d_y}; s = i, e$$
(4.68)

für die *y*-Richtung in physikalische Dichten, wie sie in den Abbildungen (4.20) und (4.21) gezeigt werden, umgerechnet. Dabei ist  $f_{sp}$  der aus (4.55) bekannte Superteilchenfaktor.



**Abbildung 4.20:** Teilchendichten integriert **Abbildung 4.21:** Teilchendichte integriert über über  $y \in [0, l_y]$  und  $z \in [0, l_z]$  (Szenario I)  $x \in [24, 56]\lambda_D$  und  $z \in [0, l_z]$  (Szenario I)

Zunächst ist nun Abbildung (4.20) zu entnehmen, dass die Dichten in x-Richtung leicht abfallen (vgl. dazu Auswertung in Tabelle (5.2)). Dabei sind Elektronen- und Ionendichte im Rahmen des Teilchenrauschens nahezu gleich dem für Szenario I erwarteten Wert von  $n_s = 10^{17} \text{ m}^{-3}$ ; s = i, e. Ausnahmen hierfür bilden der linke und der rechte Rand. Während der rechte Rand die erwartete Aufspaltung der Dichten in der Schicht zeigt, ist die Oszillation der Dichten am linken Rand (x = 0) ein durch die Prozedur hausgemachter Effekt. Wie man aber sieht, sind erstens die Oszillationen von Elektronen- und Ionendichte in Phase und somit ist auch hier die Quasineutralität des Systems gegeben. Zweitens beeinflussen sie nur einen kurzen Teil direkt hinter der Einflussfläche. Danach pendelt sich das System automatisch selbst ein. Um nun nicht die Randeffekte an den beiden Rändern in die Untersuchung der y-Richtung hineinzutragen, wurden diese Bereiche für die Auftragung in Figur (4.21) ausgespart (vgl. Formel (4.68)). An dieser Abbildung sieht man, dass das System in y-Richtung und damit auch in die äquivalente z-Richtung quasineutral ist. Die Dichten sind auch hier, wie erwartet,  $n_s = 10^{17} \text{ m}^{-3}$ ; s = i, e und bis hin zu den periodischen Rändern nahezu gleich. Eine genaue Untersuchung zeigt, dass die Ionendichte  $n_i$  relativ zur Elektronendichte  $n_e$  um

$$\delta_n := \frac{|n_i - n_e|}{n_e} \le 10\% \tag{4.69}$$

schwankt. Dieser Wert kann als ein Maß für das erwähnte Teilchenrauschen betrachtet werden.

#### 4.6.1 Bestimmung der Schichtkante

Wie bereits in Abschnitt 4.1 erwähnt, kann in der analytischen Theorie der Ort der Schichtkante über auftretende Singularitäten in den entsprechenden Flüssigkeitsgleichungen ermittelt werden [66, 70, 80]. In Simulationen ist dieser Weg jedoch nicht gangbar, da keine Multiskalenanalyse durchführbar ist. Das Programm ist durch die zuvor gewählten Einstellungen wie vor allem  $l_x$ auf eine feste Auflösung unumstößlich festgelegt. Deshalb wird hier eine Dichteanalyse (vgl. auch [3] Abschnitt 2.3) zur Bestimmung der Schichtkante, wie sie etwa schon in Darstellung (4.20) eingezeichnet ist, definiert.

Hierfür wird die obere Schranke des numerische Rauschens  $r_{max}$  der Dichten in x-Richtung zwischen  $x_1 := 15\lambda_D$  und  $x_2 := 73\lambda_D$  (Szenario I) wie folgt eingeführt

$$r_{max} = \max\Big|_{x \in [15\lambda_D, 73\lambda_D]} \left( |n_i(x) - n_e(x)| \right)$$
 (4.70)

Für andere Szenarios werden die Werte für  $x_1$  oder  $x_2$  entsprechend abgeändert. Danach wird für alle  $x \ge 73\lambda_D$  geprüft, ob

$$|n_i(x) - n_e(x)| > r_{max} \tag{4.71}$$

Der kleinste Wert  $x_{se} \in [73, 80]\lambda_D$ , für den

$$|n_i(x) - n_e(x)| > r_{max}; \forall x \ge x_{se}$$

$$(4.72)$$

gilt, wird dann als Schichtkante definiert. Für Szenario I ergibt sich nach dieser Prozedur

$$x_{se} \approx 75, 8\lambda_D \tag{4.73}$$

Es ist zu bemerken, dass das Rauschen der Dichten und damit gerade der Wert (4.70) von der Teilchenauflösung (4.56) abhängt. Dies könnte die Lage von  $x_{se}$  natürlich beeinflussen. Um die Abhängigkeit von  $x_{se}$  von der Anzahl der Simulationsteilchen zu bewerten, wird die Auflösungsstudie wie sie später in Abschnitt (6.2) genauer erläutert wird dazu genutzt, um die Konvergenz von  $x_{se}$  abzuklären.



Abbildung 4.22: Ort der Schichtkante x<sub>s</sub>e Szenario I bei unterschiedlicher Teilchenauflösung

Wie Abbildung (4.22) zu entnehmen ist, schwankt  $x_{se}$  nur sehr schwach. Genauer beträgt die relative Abweichung bezogen auf den Wert von  $\mathcal{A} \approx 500$  weniger als 3%. Dieser Wert ist

etwa um ein Drittel geringer wie das Teilchenrauschen in den Dichten (4.69). Damit ist gesichert, dass die Bestimmung der Schichtkante ein ausreichendes Konvergenzverhalten mit der Teilchenauflösung zeigt.

## 4.7 Potentialabfall in der Schicht

Nachdem nun in 4.6.1 festgelegt wurde, wo die Schichtkante anzusiedeln ist können nun die Potentiale untersucht werden. Dazu werden die betreffenden Werte mittels ladungs- und bewegungslosen "Sondenteilchen" im Zentrum der Simulationsbox bei  $(0, 5l_y; 0, 5l_z)$  entlang  $x \in [0, 80]\lambda_D$  ausgelesen.



Abbildung 4.23: Potentialverlauf (Szenario I)

Für die Auftragung (4.23) wird das Potential mittels einer Integrationskonstante so verschoben, dass

$$\left. \frac{e\Delta\phi}{T_e} \right|_{x=0} = 0 \tag{4.74}$$

gilt. Nun kann der Potentialabfall  $e^{\Delta\phi}/T_e$  in der Schicht, wie in Abbildung (4.23) gekennzeichnet, ausgelesen werden. Für Szenario I erhält man

$$\frac{e\Delta\phi}{T_e} \approx 2,41 \text{ (Szenario I)}$$
 (4.75)

Die Veränderung der physikalischen Parameter von Szenario I zu den Szenarios II a/b/c (Abb. (4.24)) zeigen zum Einen die Unabhängigkeit der Ergebnisse vom magnetischen Feld bei  $\alpha =$ 

 $0^{\circ}$  zum Anderen sieht man, dass die physikalische Dichte sowie die absoluten Werte von  $T_i$  und  $T_e$  keinen Einfluss auf die Potentialverläufe als auch den Potentialabfall in der Schicht haben. Entscheidend ist nur das Verhältnis  $T_e/T_i$  (vgl. Abb. (4.27) und (4.28)).



Abbildung 4.24: Potentialverläufe (Szenario II a/b/c)

Für die Szenarios II werden die jeweiligen Schichtkanten nahezu identisch bei  $x_{se} \approx 76, 2\lambda_D$  ermittelt. Der Potentialabfall ergibt sich stets zu

$$\frac{e\Delta\phi}{T_e} \approx 2,3 \text{ (Szenario II a/b/c)}$$
 (4.76)

Beide Werte  $x_{se}$  und  $e^{\Delta\phi}/T_e$  schwanken mit weniger als 10% und belegen damit die Behauptung der Unabhängigkeit des Potentialverlaufs von  $T_i$ ,  $T_e$  sowie n.

Die Werte (4.75) und (4.76) sind natürlich mit Fehlern behaftet. So ist beispielsweise nicht klar, wie genau die in Abschnitt 4.6.1 eingeführte Prozedur zum Auffinden der Schichtkante  $x_{se}$  tatsächlich diesen neuralgischen Punkt liefert. Nimmt man eine Genauigkeit von einer Debye-Länge an, so ist  $x_{se}$  bis auf  $\pm \lambda_D$  genau bestimmt. Diese Annahme gibt stets die Länge der entsprechenden Fehlerbalken wie etwa in den Abbildungen (4.18) und (4.25) bis (4.28) vor. Eine weitere Unsicherheit besteht in der Normierung mit  $T_e$ , für das hier zunächst die Quellentemperatur (siehe Tabellen (4.1), (4.2) und (4.3)) eingesetzt wurde. Eine genaue Analyse der Elektronenverteilung an der Schichtkante wird später in Abschnitt 5.1 einen exakteren Wert für diese Größe liefern. Um dennoch eine quantitative Auswertung des Potentialabfalls durchzuführen und um auch einen größeren Parameterbereich durchzugehen, sollen hier zwei Vergleichswerte zu (4.75) herangezogen werden.

Der eine resultiert aus der Flüssigkeitstheorie (siehe [3] Abschnitt 2.6). Man gewinnt ihn, wenn man den Ionen- gleich dem Elektronenfluss auf die Wand setzt. Dafür wird davon ausgegangen, dass für die Flussgeschwindigkeit  $\langle v_i \rangle$  der Ionen senkrecht zur Begrenzung

$$\langle v_i \rangle = c_s = \sqrt{\frac{T_i + T_e}{m_i}} \tag{4.77}$$

ist. Mit diesem isothermen Ionenfluss ergibt sich

$$\frac{-e\Delta\phi}{T_e} = \frac{1}{2}\log\left[2\pi \frac{m_e}{m_i}\left(\frac{T_i}{T_e} + 1\right)\right]$$
(4.78)

Nachstehend werden Werte, welche aus (4.78) gewonnen wurden, mit *Flüssigkeitsnäherung* betitelt.

Ein anderer, weit verbreiteter Referenzwert ist Emmert et. al [2] zu entnehmen. In dieser detaillierteren Arbeit über die Schichtbildung lassen die Autoren zunächst die exakte Struktur der Quellfunktion im Phasenraum S(x, E) offen. Dabei ist  $E = E(v_x)$  die kinetsiche Energie der Bewegung senkrecht zur Wand (x-Richtung). In der darauf folgenden Analyse wird diese Quellcharakteristik in eine sogenannte "Quellen-Form Funktion" (source-shape function) h(x)und eine Geschwindigkeitsverteilung  $g(v_x)$  (für die genaue Struktur der Emmertschen Quellverteilung siehe Abschnitt 5.2.1.3 speziell Abb. (5.14)) aufgeteilt.

$$S(x, E) = h(x) \cdot g(v_x) \tag{4.79}$$

h(x) steht dabei zunächst für räumlich nicht homogene Quellverteilungen. Weiterhin wird, wie in der Flüssigkeitsnäherung, für die Elektronen eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung angesetzt und man ist somit in der Lage, die Poisson-Gleichung in eine allgemeine *Plasma-Schicht-Gleichung* umzuformen. Diese Gleichung beschreibt dann das Potential sowohl im Plasma (Vorschicht) als auch der Schicht. Die von Emmert verfolgten Ideen sind dabei nicht neu, sondern erweitern den kalten Ionen-Fall welcher zuerst von L. Tonks und I. Langmuir untersucht wurde [81] (siehe auch Abschnitt 10.6 in [3]). Eine ausführliche Diskussion dieser Emmertschen Plasma-Schicht-Gleichung in Variablen auf der Längenskala der Vorschicht (4.38) führt schließlich zu einer transzendenten Gleichung, welche sich für die Ionenladungszahl Z = 1 wie folgt darstellt

$$1 = \sqrt{\frac{4}{\pi} \frac{T_i}{T_e}} \exp\left\{-\left(1 + \frac{T_e}{T_i}\right)\psi_1\right\} D(\sqrt{\psi_1}) + \operatorname{erf}\left\{\sqrt{\frac{T_e}{T_i}}\psi_1\right\}$$
(4.80)

 $\psi_1$  steht dabei für das dimensionslose Potential auf der Plasmaseite der Schicht. Dabei ist

$$D(x) := \int_0^x \exp\left\{t^2\right\} dt$$
 (4.81)

und erf(x) bezeichnet die Standard-Error-Funktion.

Im Gegensatz zu  $\psi_1$  ist  $\psi_2$ , das Potential direkt an der Wand, von h(x) abhängig. Um eine exakte Aussage über diese entscheidende Größe treffen zu können, muss eine Annahme für h(x) gemacht werden. Die einfachste Anforderung, die man in diesem Zusammenhang erheben kann, ist eine homogen verteilte Quelle  $(h(x) \equiv 1)$ . Dies führt letztendlich auf

$$\psi_2 = -\log\left[\sqrt{\frac{m_p}{m_e}\frac{1}{4\pi}} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{T_i}{T_e}\right)} \cdot \frac{\pi}{2\exp\left\{-\psi_1\right\} D\left(\sqrt{\psi_1}\right)}\right]$$
(4.82)

Im Weiteren Verlauf von [2] wird Gleichung (4.82) eingehend diskutiert und angewendet. Letztendlich können die Autoren noch die Unabhängigkeit der analytischen Gestalt von (4.82) von der speziellen Wahl von h(x) zeigen. An dieser Stelle der vorliegenden Arbeit ist jedoch zunächst nur wichtig, dass der Potentialabfall in der Schicht sich aus

$$\frac{|e\Delta\phi|}{T_e} = |\psi_2| - |\psi_1|$$
(4.83)

ergibt. Mit den Gleichungen (4.80), (4.82) und (4.83) ist damit eine eindeutig Vorschrift zur Gewinnung von Werten für den Potentialabfall in der Schicht festgelegt. Sie reproduziert nahezu identisch die Angaben, welche in [72] (geklammerte Theoriewerte in Tabelle 1) bereitgestellt werden. Die physikalischen Werte von Szenario I bedingen nun

$$\left(\frac{|e\Delta\phi|}{T_e}\right)_{fl} \stackrel{(4.78)}{\approx} 2,49 \left(\frac{|e\Delta\phi|}{T_e}\right)_{em} \stackrel{(4.83)}{\approx} 2,56$$

$$(4.84)$$

Diese Werte sind maximal 5,9% vom Simulationsergebnis (4.75) und 9,8% von (4.76) entfernt. Damit ist belegt, dass das vorgestellte Schichtmodell im Rahmen seiner statistischen Genauigkeit bei der Bestimmung der Schichtkante den Potentialabfall in der Schicht konsistent mit der Theorie von Emmert wiedergibt. Der erste Test des Schichtmodells zeigt also eine sehr gute Übereinstimmung mit dem stoßfreien Vergleichsmodell von Emmert. Um das Modell für einen größeren Parameterbereich zu testen, wurde Szenario I nun dahingehend abgeändert, als dass verschiedene Ionenmassen (vgl. abschließende Bemerkung in Abschnitt 3.3) berücksichtigt wurden. Damit ändert man das Verhältnis  $m_i/m_e$ . Die Ergebnisse dieser Tests werden in den Abbildungen (4.25) und (4.26) dargestellt.

Vergleicht man die Resultate sowohl mit den Werten aus der Emmert-Prozedur als auch der Flüssigkeitsnäherung, so sieht man, dass alle drei Lösungsszenarios dicht beieinander liegen. Die Fehlerbalken für die Simulationsergebnisse resultieren dabei, wie gesagt, aus der Annahme, dass die Schichtkante  $x_{se}$  bis auf eine Debye-Länge genau gefunden wird. Wie man sieht, verringert allein diese Fehlerschranke den Wert für  $|e\Delta\phi|/T_e$  enorm. Der Grund hierfür liegt in dem steilen Potentialabfall in der Schicht (4.23), also für Werte  $x > x_{se}$ . Eine kleine Abweichung von  $x_{se}$  bedingt dann ein wesentlich kleineres  $|e\Delta\phi|/T_e$ . Man bemerkt nun, dass im Rahmen dieses selbstgesteckten Fehlers die Simulationsergebnisse im Bereich beider Referenzklassen liegen. Weiterhin zeigt die logarithmische Auftragung in (4.26), dass die Resultate den durch beide Theorien, Emmert und Flüssigkeitstheorie, vorgegebenen logarithmischen Verlauf reproduzieren. Es ist also zu schließen, dass die Simulation für verschiedene Massenverhältnisse verlässliche Ergebnisse liefert. Zusätzlich ist noch zu erwähnen, dass prinzipiell alle drei Wertemengen mit einem Fehler bezüglich  $T_e/T_i$  behaftet sind. Dieser resultiert aus einer Unkenntnis



Abbildung 4.25: Potentialabfall in der Schicht Abbildung 4.26: Potentialabfall in der Schicht bei unterschiedlichen Massenverhältnissen



bei unterschiedlichen Massenverhältnissen (logarithmische Auftragung)

der Ionentemperatur  $T_i$  an der Schichtkante (vgl. Abschnitt 5.2). Da dieser Wert nicht sofort zugänglich und auch schwer definierbar ist, wurden für die vorliegenden Tests wieder die Werte der Quelle benutzt. Um jedoch ein Gefühl für den Einfluss von  $T_i$  zu bekommen und um den Parameterbereich zu erhöhen, wird das Testszenario nun auf unterschiedliche Temperaturen der Teilchenspezies ausgeweitet. Als Grundlage dienen wieder die Werte aus Szenario I, diesmal aber für unterschiedliche Verhältnisse von  $T_e/T_i$ . Da schon durch Tests belegt wurde, dass verschiedene Massenverhältnisse die Ergebnisse qualitativ nicht ändern, wird dieses Resultat gleich ausgenutzt und eine leichtere Ionenmasse  $m_i = 400 \cdot m_e$  eingesetzt. Diese Maßnahme erhöht die Ionenschallgeschwindigkeit und kürzt damit die benötigten Schritte K (4.58) bis zur Konvergenz der Systeme ab.



bei unterschiedlichen Temperaturverhältnissen bei unterschiedlichen Temperaturverhältnissen

Abbildung 4.27: Potentialabfall in der Schicht Abbildung 4.28: Potentialabfall in der Schicht (logarithmische Auftragung)

Auch bei den Auftragungen (4.27) und (4.28) wurden wieder auf die beschriebene Art Fehlerbalken an die Simulationsergebnisse angeheftet. Der Vergleich mit den Ausdrücken (4.78) und (4.83) zeigt wieder eine sehr gute Übereinstimmung mit der Theorie. Auch hier bestätigt die logarithmische Auftragung (4.28) die erwartete Wiedergabe des Trends durch die Simulation. Es scheint jedoch, als ob die Simulationsergebnisse eher dem Modell von Emmert als der Flüssigkeitstheorie folgen. Allerdings lässt sich, aufgrund der langen Fehlerbalken, darüber nicht zweifelsfrei urteilen. Die hier gezeigten Tests belegen die im Rahmen bisheriger Theorien physikalische Verlässlichkeit des vorgestellten Wandmodells für einen weiten Parameterbereich.

Zum Abschluss der hier ausgeführten Studien soll noch der Einfluss der Systemlänge  $l_x$  auf die präsentierten Ergebnisse bewertet werden. Dies geschieht aus zweierlei Gründen. Einerseits kann hier die Prozedur zum Auffinden der Schichtkante aus Paragraph 4.6.1 nochmals überprüft werden, andererseits muss sichergestellt werden, dass die Artefakte durch das Einblasen der Teilchen bei x = 0 (vgl. Abb. (4.20) und (5.7)) die Schicht und die Schichtkante nicht entscheidend beeinflussen.



Abbildung 4.29: Potentialabfall in der Schicht bei verschiedenen  $l_x$  (Szenario I und Szenarios I a/b/c)

Man entnimmt nun den in (4.29) dargestellten Daten, dass der Potentialabfall in der Schicht für Längen  $l_x \ge 40\lambda_D$  maximal um 7% schwankt. Dieser Wert liegt innerhalb des Teilchenrauschens (4.69) und kann deshalb als unkritisch betrachtet werden. Es stellt sich also zunächst eine von der Systemlänge unabhängige Konvergenz analog zu Emmert et. al [2] ein. Für eine Systemlänge von  $l_x = 20\lambda_D$  weicht der Wert jedoch schon um 12% von dem bei  $l_x = 80\lambda_D$  ab und muss deshalb verworfen werden. Diese Untersuchung belegt nun, dass Aussagen über die Schichtkante bei Systemen der Länge  $l_x = 80\lambda_D$  frei von Einflüssen des linken Randes sind. Weitere Gegenüberstellungen mit der Theorie von Emmert et. al [2] sind dem Auswertungsabschnitt 5.4 zu entnehmen.

# Kapitel 5

# Anwendung und Auswertung des Wandmodells

Im letzten Kapitel wurde ein 1d Modell zur Simulation von Plasma-Wand-Schnittstellen ausführlich eingeführt und anhand von semianalytischen Arbeiten validiert. Das so begründete Wandteilchenkonzept steht nun also bereit, um physikalische Erkenntnisse zu extrahieren. In diesem Sinne wird zunächst sowohl die Elektronen- 5.1 als auch die Ionenkinetik 5.2 untersucht. Ultimativ gelingt es, eine Funktionenklasse zu definieren 5.2.1, welche die Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante beschreibt. Basierend auf ersten Parameterstudien 5.2.1.2 wird diese dann diskutiert und mit dem Modell von Emmert et. al [2] verglichen.

Danach wird das System stark vergrößert und so erstmals vollkinetische, stößige Systeme untersucht 5.2.3. Mittels eines einfachen Monte-Carlo-Hintergrundreibungsmodells ist es dann noch zusätzlich möglich, Simulationen mit einem Neutralgashintergrund durchzuführen und auszuwerten 5.2.4.

Weiter wird die Modellpalette erweitert und Szenarios mit relativ zur Oberflächennormale gedrehtem B-Feld untersucht 5.3. Die so entstehende magnetische Vorschicht wird dann validiert und diskutiert. Das Kapitel endet mit zwei Auswertungsabschnitten 5.4. In diesen werden gewonnene, numerische Ergebnisse bereits existenten, semianalytischen Arbeiten tabelliert gegenüberstellt.

## 5.1 Elektronenkinetik

Bei der Untersuchung der Kinetik der Elektronen muss als Erstes untersucht werden, wie sich die Temperatur, vorgegeben über die Quelle, durch das System hindurch in x-Richtung fortpflanzt. Dazu ist in Abbildung (5.1) die Dichte der Verteilung der Elektronengeschwindigkeiten in z-Richtung aufgetragen. Der gezeigte Bereich liegt im Zentrum der Simulationsbox zwischen  $[0, 5 - 0, 55]l_x$  (Bereich 2 (5.4)). Die Elektronengeschwindigkeiten werden dabei mit der thermischen Geschwindigkeit  $v_{th}$ 

$$v_{th} := \sqrt{\frac{8 T_e}{\pi m_e}} \tag{5.1}$$

#### normiert.



**Abbildung 5.1:** Elektronengeschwindigkeitsverteilung in z-Richtung (Szenario I) im Bereich 2  $[0, 5-0, 55]l_x$ 

Man sieht, dass die Verteilung nahezu exakt einer Gauß-Verteilung mit  $T_e = 80$  eV entspricht. Eine genaue Untersuchung mittels des gezeigten Fits gibt eine Varianz von (5.2)

$$\sigma^{2} = \frac{T_{e}^{(z)}}{m_{e}} \approx 1,53 \cdot 10^{13} \,\left(\frac{\rm m}{\rm s}\right)^{2} \tag{5.2}$$

Damit ergibt sich die transversale Temperatur in z-Richtung zu

$$T_e^{(z)} \approx 87 \text{ eV} \tag{5.3}$$

und weicht demnach um etwa 9% von der Quellentemperatur ab. Im Rahmen der Teilchenstatistik in diesem Bereich (4.69) ist daher die stets verwendete Annahme eines mit der Quellentemperatur thermalisierten Ensembles in z-Richtung belegt (vgl. auch Abschnitt 6.1). Gleiche Diagnostiken in die verbleibende senkrechte y-Richtung zeigen analoge Resultate, in allen Bereichen (5.4)

Bereich 1 : 
$$[0, 04 - 0, 09] l_x \stackrel{\text{Szenario I}}{\approx} [3 - 7] \lambda_D$$
  
Bereich 2 :  $[0, 5 - 0, 55] l_x \stackrel{\text{Szenario I}}{\approx} [40 - 44] \lambda_D$   
Bereich 3 :  $[0, 9 - 0, 95] l_x \stackrel{\text{Szenario I}}{\approx} [72 - 76] \lambda_D$  (5.4)

Aus den obigen Intervallen entnimmt man, dass Bereich 3 direkt an der Schichtkante liegt. Er ist somit der interessanteste für weitere Untersuchungen. Zunächst ist jedoch in Abbildung (5.2)


der komplette Phasenraum in x-Richtung für die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Wand ( $v_x$ -Komponente) gezeigt.

Abbildung 5.2: Phasenraum der ElektronenAbbildung 5.3: Elektronengeschwindigkeits-<br/>verteilungen in den Bereichen 1-3 (siehe Abb.<br/>(5.2))

Man sieht, dass in der Schicht die rückläufigen, hochenergetischen Elektronen fehlen. Dieser Verlusteffekt wird im nächsten Paragraphen gesondert untersucht.

Zunächst ist eine detaillierte Auftragung der  $v_x$ -Komponente in Abbildung (5.3) vorgenommen. Es ist zu erkennen, dass die drei Verteilungen aus den einzelnen Bereichen nahezu perfekt koinzidieren. Außerdem sind sie in guter Näherung mit  $T_e = 80$  eV thermalisiert. Aus diesen beiden Tatsachen lässt sich schließen, dass die Elektronen tatsächlich über das gesamte System hinweg Maxwell-Boltzmann verteilt sind. Eine Annahme, die in der Literatur weit verbreitet ist, und die unter anderem auch in die beiden Theorien über den Potentialabfall in der Schicht (4.78) und (4.83) Eingang findet.

## 5.1.1 Fehlen hochenergetischer Elektronen

Wie bereits angedeutet weisen die Simulationsergebnisse einen speziellen kinetischen Effekt aus. An der Darstellung des Phasenraums (5.2) ist im Bereich der Schichtkante zu bemerken, dass der hochenergetische Anteil der Elektronen mit  $v_x < 0$  fehlt. Dieser Mangel an schnellen, rückläufigen Elektronen wird dann bei Annäherung an die Quellregion durch Viskosität und die Quellverteilung [21] wieder ausgeglichen. Auch Abbildung (5.3) zeigt diesen Wiederauffüllungseffekt am hochenergetisch, rückläufigen Ende der Verteilungen. Um dieses Ergebnis stärker herauszuarbeiten, werden die Anteile der Elektronenverteilungen in den 3 Bereichen für negative Geschwindigkeiten nochmals logarithmisch in Abbildung (5.4) dargestellt.

Man sieht nun an Darstellung (5.4) zweifelsfrei, wie sich der fehlende Anteil der Geschwindigkeitsverteilungen von der Schichtkante hin zur Quelle schrittweise wieder auffüllt.

Physikalisch begründet sich das Fehlen dieses Teils der Wahrscheinlichkeitsdichte im steilen Potentialabfall (4.23) in der Schicht. Diese Barriere kann nur von den schnellen, vorwärtslaufenden Elektronen durchdrungen werden. Elektronen, die eine Geschwindigkeit  $v_x < v_{cut}$  (5.5)



Abbildung 5.4: Elektronengeschwindigkeitsverteilungen aus Abb. (5.2), logarithmische Auftragung

haben, werden reflektiert. Für die Kinetik hat dies zur Folge, dass die Verteilung bei dieser charakteristischen Geschwindigkeit abgeschnitten ist (vgl. [3] Abb. (2.5)). Den theoretischen Wert von  $v_{cut}$  erhält man, wenn man die kinetische Energie der Elektronen in x-Richtung der Höhe der Potentialbarriere gleich setzt [3, 21]

$$\frac{1}{2}m_e v_{cut}^2 = e\Delta\phi \Rightarrow v_{cut} = -\sqrt{\frac{2e\Delta\phi}{m_e}}$$
(5.5)

Mit dem Wert (4.75) und der Quellentemperatur  $T_e = 80$  eV erhält man

$$\frac{v_{cut}}{v_{th}} \approx -1,37\tag{5.6}$$

Eine genauere Untersuchung der Geschwindigkeitsverteilung im Bereich 3 an der Schichtkante (Abb. (5.5)) zeigt, dass der ermittelte Wert (5.6) genau das Simulationsergebnis bestätigt.

An dieser Übereinstimmung zwischen Theorie und Simulation wird erneut eine Stärke der hier ausgeführten kinetischen Simulationen sichtbar. Die sehr hohe Teilchenauflösung und die mit ihr verbundene sehr gute Statistik (vgl. Abschnitt 6.2) ermöglichen nun erstmals eine eindeutige Auflösung des beschriebenen Phänomens. Ganz so, wie es nicht Langmuir 1920, sondern erst Rayment et. al 1968 [22] gelang,  $v_{cut}$  diese experimentell nachzuweisen konnte bisher keine uns bekannte, numerisch Simulation diesen Effekt zweifelsfrei auflösen (vgl. hierzu vor allem Fig. 6 und 7 in [21]).



Abbildung 5.5: Elektronengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I) ohne hochenergetische, rückläufige Elektronen

# 5.2 Ionenkinetik

Wendet man sich nun der Kinetik der Ionen zu, so ist es auch hier zunächst obligatorisch, die transversale Temperatur etwa in z-Richtung zu bestimmen. Dazu wird mittels Graph (5.6) im Bereich 2 (5.4) die entsprechende Geschwindigkeitsverteilung untersucht.



Abbildung 5.6: Ionengeschwindigkeitsverteilung in z-Richtung (Szenario I) im Bereich  $[0, 5 - 0, 55]l_x$ 

Anders als bei den Elektronen ist es hier nicht nötig, zwischen Theoriekurve und numerischen Fit zu unterscheiden (vgl. auch Abschnitt 6.1), da beide mit unter 1% Abweichung von  $T_i = 80$  eV zusammenfallen. Das heißt, auch hier ist es eindeutig, dass die Ionen die von der Quelle vorgegebene Temperatur ungestört zur Wand transportieren.

Betrachtet man nun den Phasenraum der Ionen mittels Abbildung (5.7), so fällt sofort der Wirbel am linken Rand (x = 0) auf. Diese Störung ist schon im Kontext der Dichten (Abb. (4.20)) als ein Artefakt der Einflussbedingung identifiziert worden. Genauere Untersuchungen legen die Vermutung nahe, dass es sich um eine Zwei-Strom-Instabilität [67] zwischen stationärem Plasma und dem Quellstrom handelt. Wie man sieht, klingt diese aber sehr schnell für größere Werte von x ab. Das System geht somit im mittleren Simulationsbereich in einen Gleichgewichtszustand über. Die Instabilität am linken Rand hat demnach keinen Einfluss auf das Studium der Kinetik an der Schichtkante (Paragraph 5.2.1).

Untersucht man weiter die Geschwindigkeitsstatistiken in den vorgezeichneten Bereichen (5.4), so stellt man fest, dass die Ionen erwartungsgemäß zur Wand hin beschleunigt werden. Damit ist klar, dass sich das Potential, wie in (4.23) gezeigt, so justiert, dass die Ionen das Bohm-Kriterium (4.1) (siehe dazu nächsten Abschnitt 5.2.1) erfüllen. Damit gewährleistet das System völlig autonom das Kriterium für einen stabile Schichtkante.

Weiter scheint es, dass die Ionenverteilungen in ihrem Verlauf durch das System schmaler werden. Um dies zu untersuchen betrachtet man die Varianz

$$\sigma^2 := \langle (v_x^i)^2 \rangle - \langle v_x^i \rangle^2 \tag{5.7}$$

Diese könnte man direkt mit einer *kinetischen Ionentemperatur* interpretieren. Für die drei Bereiche 1, 2 und 3 (5.4) ergeben sich aus den Rohdaten die Mittelwerte  $\langle v_x^i \rangle$  sowie die Varianzen



rio I)

Abbildung 5.7: Phasenraum der Ionen (Szena- Abbildung 5.8: Ionengeschwindigkeitsverteilungen in den Bereichen 1-3 (siehe Abb. (5.7))

 $\sigma^2$ :

Bereich 1 : 
$$\langle v_x^i \rangle_1 \approx 0,96 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}} \approx 0,77 \, c_s \, ; \, \sigma_1^2 \approx 2,1 \cdot 10^9 \, \left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right)^2$$
  
Bereich 2 :  $\langle v_x^i \rangle_2 \approx 1,23 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}} \approx 1,0 \, c_s \, ; \, \sigma_2^2 \approx 1,7 \cdot 10^9 \, \left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right)^2$   
Bereich 3 :  $\langle v_x^i \rangle_3 \approx 1,51 \cdot 10^5 \frac{\text{m}}{\text{s}} \approx 1,22 \, c_s \, ; \, \sigma_3^2 \approx 1,4 \cdot 10^9 \, \left(\frac{\text{m}}{\text{s}}\right)^2$  (5.8)

Man sieht daran eindeutig, dass die Streubreite der Ionengeschwindigkeit tatsächlich abnimmt. Die Ionen scheinen also in einer Art adiabatischen Abkühlung Teile ihrer ungeordneten, thermischen Geschwindigkeit in eine gerichtete Flussgeschwindigkeit umzuwandeln. Dieses Ergebnis deckt sich qualitativ mit dem stoßfreien Fall von J. T. Scheuer und G. A Emmert [24]. Quantitativ lässt sich etwa die mittlere Geschwindigkeit an der Schichtkante (Bereich 3; grüne Linie in Abb. (5.8)) mit bereits existierenden, semianalytischen Arbeiten vergleichen. Dies geschieht zusammen mit anderen schichtrelevanten Werten übersichtlich und detailliert in Abschnitt 5.4.1.

#### 5.2.1 Geschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante

Wie schon im letzten Paragraphen angeschnitten wurde, ist ein entscheidender Diskussionspunkt die Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (vgl. u.a. Kapitel 25 in [3]). Sie bestimmt Größe und Intensität von Teilchen und Energieflüssen in die Schicht. Damit ist ihre möglichst genaue Kenntnis obligatorisch, um gute Aussagen etwa über die Belastungen von Bauteilen, welche im direkten Kontakt mit dem Fusionsplasma (Plasma Facing Materials) stehen, zu treffen. Zwecks der Vertiefung einer entsprechenden Diskussion wird die entscheidende Wahrscheinlichkeitsdichte aus Bereich 3, wie sie schon in (5.8) dargestellt ist, nochmals in Abbildung (5.9) vergrößert aufgetragen. Zusätzlich ist in das Diagramm die Ionengeschwindigkeitsverteilung eingearbeitet, wie sie Emmert et. al [2] (siehe Anhang D) postulieren. Um

den anstehenden Vergleich zu standardisieren, wurde die Emmert-Kurve ebenfalls auf 1 normiert. Der angegebene Wert  $v_0$  gibt die Lage des Maximums der Verteilung nach Emmert et. al. Er wird in [2] durch

$$v_0 := \sqrt{\frac{2}{m_p} \cdot e \ T_e \ \psi_1} \stackrel{(4.80)}{\approx} 0,64 \ c_s \tag{5.9}$$

definiert.  $v_0$  beschreibt damit die Geschwindigkeit der Teilchen, die am Quellpunkt mit  $v_{start} = 0$  gestartet sind und danach reibungsfrei bis zur Schichtkante potentielle Energie in kinetische umgewandelt haben (vgl. Anhang D).



Abbildung 5.9: Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I) mit numerischem Fit der Art (5.16) sowie Kurve nach Emmert et. al [2]

Man sieht an Darstellung (5.9), dass das Maximum der Emmert-Kurve deutlich im langsameren Geschwindigkeitsbereich liegt als das der Simulationskurve. Ein Grund dafür ist die unterschiedliche Quellbedingung, die beiden Szenarios zugrunde liegt (siehe Diskussion in [3] Kapitel 25 oder auch [79] Abschnitt V). Während Emmert et. al von einer Volumenquelle in Form von h(x) (Quellen-Form-Funktion) ausgeht, wird im vorliegenden Modell ein Fluss im Bereich  $x = v_x \Delta t \cdot r_1$  (vgl. (4.51)) initialisiert. Demzufolge ist der Anteil der Emmert-Verteilung, welcher links von  $v_0$  liegt, gleich dem Anteil der Ionen, welche an der Quelle mit Geschwindigkeiten  $v_{start} < 0$  starteten. Für die im vorliegenden Modell implementierte Quellprozedur (vgl. Glg. (4.50) sowie Abb. (5.14)) liegt das Maximum der Verteilung in der Quellregion (nicht zu verwechseln mit der Quellverteilung), bedingt durch den Fluss, jedoch nicht bei  $v_m = 0$ . Im stationären Zustand lässt sich aus der Verteilung im Bereich 1 (schwarze Verteilung in (5.8))

$$v_m^{(1)} \approx 0,42 \ c_s$$
 (5.10)

ablesen. Verschiebt man die Emmert-Kurve um diesen Wert nach rechts (gestrichelte Kurve in (5.9)), so sieht man, dass das Maximum der so neu entstandenen Verteilung und des Simulationsergebnisses nahezu an der gleichen Stelle liegen. Der Potentialgradient im Emmert-Modell und der selbstkonsistenten Simulation ist also nahezu identisch und die Differenz in der kinetische Energie ist schlicht auf die unterschiedlichen Bedingungen in der Quellregion zurückzuführen (vgl. auch [72]). Anders lässt sich dieser Sachverhalt noch weiter verdeutlichen, indem man die Differenz der Lage der Maxima in den Bereichen 1 und 3 (schwarzes Histogramm und blaues Histogramm in Abb. (5.8)) betrachtet. Sie beträgt

$$v_m^{(3)} - v_m^{(1)} \approx 0,62 c_s \tag{5.11}$$

und ist somit nahezu identisch zu  $v_0$  nach Emmert et. al (Glg. (5.9)). Um den andiskutierten Einfluss der Quellbedingung weiter zu vertiefen, wurde ein extra Szenario mit den Vorraussetzungen nach Emmert et. al aufgesetzt. Die entsprechenden Ergebnisse werden am Ende dieses Abschnittes in Paragraph 5.2.1.3 vorgestellt.

Als nächstes wird das kinetische Bohm-Kriterium (4.36) mittels der Histogrammdaten aus (5.12) überprüft.

$$\int_{0}^{\infty} \frac{f_{se}^{(hist)}(v_{x}^{i})}{(v_{x}^{i})^{2}} dv \approx 5,04 \cdot 10^{-11} \frac{\mathrm{s}^{2}}{\mathrm{m}^{2}} \leq \frac{m_{i}}{T_{e}} \approx 1,305 \cdot 10^{-10} \frac{\mathrm{s}^{2}}{\mathrm{m}^{2}}$$
$$\Leftrightarrow 0,77 \cdot c_{s}^{-2} \leq 2,00 \cdot c_{s}^{-2} \tag{5.12}$$

Es zeigt sich, dass das Kriterium erwartungsgemäß erfüllt wird. Damit ist ein Beleg erbracht, dass das Modell sich automatisch selbst hin zu einer stabilen Potentiallösung justiert. Die sehr hohe Teilchenauflösung, welche sich in einem sehr detaillierten Histogramm (5.9) manifestiert, eröffnet nun zudem die Möglichkeit, eine glatte Funktionenklasse zu diskutieren, um die Ionengeschwindigkeitsverteilung an diesem neuralgischen Punkt zu charakterisieren. Als möglichen Kandidat kann man eine Summe aus Funktionen der Form

$$f_{a_{j_0},a_{j_1},a_{j_2}}^{(j)}(v_x^i) = \frac{1}{c_s} \mathcal{N}(a_{j_0},a_{j_1},a_{j_2}) \cdot \left(\frac{v_x^i}{c_s}\right)^{a_{j_0}} \exp\left\{-a_{j_1} \left(\frac{v_x^i}{c_s}\right)^{a_{j_2}}\right\}$$
(5.13)  
wobei :  $a_{j_0} \ge 2 \wedge a_{j_1}, a_{j_2}, v_x^i \in \mathbb{R}^+$ 

heranziehen. Dabei werden Geschwindigkeiten  $v_x^i < 0$  aus dem Wertebereich ausgeklammert. Die Wand wird also als perfekt absorbierend postuliert [3]. Somit ergeben sich die Normierungskonstanten  $\mathcal{N}$  zu

$$\mathcal{N}(a_{j_0}, a_{j_1}, a_{j_2}) = \left(\frac{\Gamma\left(\frac{a_{j_0}+1}{a_{j_2}}\right) \cdot a_{j_1}^{-\left(\frac{a_{j_0}+1}{a_{j_2}}\right)}}{a_{j_2}}\right)^{-1}$$
(5.14)

Wobei  $\Gamma(x)$  die Standard-Gamma-Funktion [60]

$$\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \; ; x \in \mathbb{R}$$
(5.15)

ist. Besagte Summe stellt sich also in Gänze wie folgt dar

$$f_{se}(v_x^i) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f_{a_{j_0}, a_{j_1}, a_{j_2}}^{(j)}(v_x^i)$$
(5.16)

wobei : 
$$n < \infty \land a_{j_0} \ge 2 \land a_{j_1}, a_{j_2}, v_x^i \in \mathbb{R}^+$$

Fordert man zusätzlich  $a_{j_0} \ge 2$ ;  $\forall j = 1, ..., n$ , dann wird  $f_{se}(v_x^i)/(v_x^i)^2$  nicht singulär in  $v_i = 0$  und Integrale der Form (5.12) sind problemlos lösbar.

<u>Bemerkung</u>: Bevor die eigentliche Diskussion der Funktionenklasse (5.16) folgt, muss an dieser Stelle noch eine Bemerkung über die Wahl derselbigen fallen. Beim Studium von  $f_{se}(v_x^i)$  fällt sofort auf, dass die Summe aus dem arithmetischen Mittel der drei beteiligten Funktionen besteht. Man könnte natürlich einen flexibleren Ansatz vorschlagen, indem man die Einzelbeiträge zu  $f_{se}(v_x^i)$  etwa durch weitere Fitparameter variabel gestaltet. In der Tat wurde ein entsprechender Ansatz getestet. Es zeigt sich jedoch, dass das Fitprogramm (siehe Abschnitt 5.2.1.1) die Gewichtung dann intrinsisch gleich wählt. Man muss diese Freiheit also nicht berücksichtigen.

Um nun die Annahme (5.16) zu validieren, wird eine Funktion des Typs (5.16) an das Histogramm der Schichtkante angefitet. Mit n = 3 hat man neun freie Parameter

$$a_{j_s}$$
;  $j = 1, 2, 3 \land s = 0, 1, 2$ 

Das Resultat ist Abbildung (5.9) zu entnehmen. Die Fitwerte für die gezeigte Abbildung sind dabei

$$a_{10} = 47,3532; a_{11} = 25,9091; a_{12} = 1,49691$$
  
 $a_{20} = 65,6648; a_{21} = 43,5301; a_{22} = 1,56024$   
 $a_{30} = 31,6395; a_{31} = 30,6959; a_{32} = 0,776479$  (5.17)

Abbildung (5.10) zeigt die einzelnen Funktionsbeiträge aus der Summe (5.16) zu der Fitfunktion in Graph (5.9). An dieser aufgeschlüsselten Darstellung (5.10) sieht man, dass sowohl der Anstieg als auch das entsprechende Abklingen nach Durchlaufen des Maximums nur durch jeweils eine der drei beteiligten Funktionen geleistet wird. Der Verlauf der Kurve gleicht nach dem Maximum somit einer abnehmenden Exponentialfunktion. Dieses Verhalten ist demnach



Abbildung 5.10: Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario I). Beiträge der einzelnen Funktionsteile

analog mit der Diskussion aus Emmert et. al [2], wo die Kurve nach  $v_0$  als Maxwellsch bezeichnet wird (vgl. Anhang D). Folgerichtig liefert die dritte Funktion nur im Bereich des Maximums einen nicht verschwindenden Beitrag. Mit dieser Erkenntnis ist auch geklärt, warum man ausgerechnet mit drei Funktion (n = 3) in der Summe (5.16) die besten Fitergebnisse erzielt. Eine Funktion beschreibt den Anstieg und eine das Abklingen, während die dritte benötigt wird, um den Maximumsbereich glatt anzupassen. Diese Eigenschaft unterscheidet die hier diskutierte Funktionenklasse somit zusätzlich von der Emmert-Kurve.

Als erster Auswertungsansatz wird der Wert

$$\xi := \frac{m_i \cdot \langle (v_x^i)^2 \rangle}{2 \cdot T_i} = \frac{\langle E_{kin} \rangle}{T_i}$$
(5.18)

eingeführt. Er berechnet sich direkt aus den Histogrammdaten für Szenario I zu

$$\xi_I \approx 1,584 \tag{5.19}$$

Es fällt sofort die Ähnlichkeit zu den Exponenten  $a_{12}$ ,  $a_{22}$  und  $a_{32}$  ins Auge. Genauer lässt sich annehmen, dass

$$a_{12} \approx \xi_I; \ a_{22} \approx \xi_I; \ a_{32} \approx \frac{1}{2} \cdot \xi_I$$
 (5.20)

Diese Vermutung gilt es, im folgenden Abschnitt 5.2.1.2 weiter zu untermauern. Eine weitere interessante Prüfgröße (*kinetische Temperatur* aus Abschnitt 5.2) ist eine renormierte Varianz. Basierend auf Definition (5.7) führt man sie wie folgt ein

$$\widetilde{\sigma}^2 := \frac{\sigma^2}{c_s^2} \overset{\text{Szenario I}}{\approx} 0,091 \tag{5.21}$$

Es wird angenommen, dass diese Werte, genau wie die restliche Schichtphysik, nicht von den absoluten Temperaturen, sondern nur vom Verhältnis  $T_e/T_i$  abhängen. Um dies genauer zu studieren, soll der Paragraph 5.2.1.2 dienen. Weitere schichtrelevante Werte und Daten werden dann in Abschnitt 5.4.1 bestehenden Theorien gegenübergestellt.

### 5.2.1.1 Fit Güte

Abschließend müssen an dieser Stelle noch einige wenige Stellungnahmen zur Güte der Fits, wie sie etwa in Abbildung (5.9) dargestellt sind, getätigt werden. Generell ist zu erwähnen, dass die Fits in den letzten beiden Kapiteln dieser Arbeit mittels der in *xmgrace* [82] intrinsisch enthaltenen Fitprozedur erstellt wurden. Als ein Wert für die Güte der Anpassung wird dabei der *Korrelationskoeffizient*  $\rho_K$  berechnet. Dieser wird nun für alle folgenden Fits angegeben werden. Für die Anpassung in Abbildung (5.9) beträgt er

$$\rho_K \approx 0,998\tag{5.22}$$

Dieser Wert von  $\rho \approx 1$  bestätigt das hohe Maß der Übereinstimmung zwischen der Funktion und der Histogrammdaten.

Eine weitere Idee wäre es, einen Signifikanztest (siehe etwa auch Abschnitt 6.2) direkt durchzuführen. Jedoch aufgrund der sehr flach auslaufenden Wahrscheinlichkeitsdichte (vgl.  $v_x^i$  in Abb. (5.9)) müssten für einen verwertbaren Test zu viele Boxen zusammengelegt werden, um ein aussagekräftiges Ergebnis zu erhalten.

Ein weiteres, heuristisches Maß für die Güte des Fits lässt sich noch mittels des Bohm-Integral (4.36) einführen. Dazu wird Letzteres nochmals analytisch mit der Funktion (5.16) integriert.

$$\int_0^\infty \frac{f_{se}(v_x^i)}{(v_x^i)^2} \, dv \approx 5,09 \cdot 10^{-11} \, \frac{\mathrm{s}^2}{\mathrm{m}^2} \tag{5.23}$$

Dieser Wert weicht damit nur um  $\sim 1\%$  von dem numerischen (5.12) ab, was auf eine sehr gute Abdeckung der gewichteten Histogrammfläche durch die Fitkurve hinweist.

#### 5.2.1.2 Erste Parameterstudien

Nachdem die Validierung der Funktionenklasse mittels Szenario I erfolgt ist, sollen die Szenarios II a/b/c dazu herangezogen werden, eine erste Parameterstudie für die Fitparameter zu absolvieren. Wie an Tabelle (4.2) zu erkennen ist, unterscheiden sich die drei Unterszenarios a, b und c nur durch die Temperatur. Man kann also versuchen, einen Trend für die Temperaturabhängigkeit der Fitparameter zu erkennen. Dazu werden zunächst die Ionengeschwindigkeitsverteilungen im Bereich 3 (5.4) mittels der Klasse (5.16) und n = 3 angenähert. Das Ergebnis ist Abbildung (5.11) zu entnehmen.



Abbildung 5.11: Ionengeschwindigkeitsverteilungen im Bereich 3 (Szenario II a/b/c)

Zunächst fällt ins Auge, dass alle drei Verteilungen, im Gegensatz zu der Darstellung (5.9) oder (5.22), wesentlich steiler ansteigen und auch im Bereich höherer Geschwindigkeiten noch eine leichte Schulter aufweisen. Die Werte für die jeweiligen Korrelationskoeffizienten  $\rho_K$  sowie der jeweils 9 Fitparameter lauten

Szenario II a ( $T_i = T_e = 15 \text{ eV}$ ):

$$\rho_{K} \approx 0,997$$

$$a_{10} = 30,0525; a_{11} = 28,8289; a_{12} = 0,825018$$

$$a_{20} = 46,3296; a_{21} = 34,6816; a_{22} = 1,25829$$

$$a_{30} = 85,3262; a_{31} = 79,9218; a_{32} = 1,3393$$

$$\frac{\langle v_{x}^{i} \rangle}{c_{s}} \approx 1,17; \, \tilde{\sigma}^{2} \approx 0,092; \, \xi_{a} \approx 1,34 \qquad (5.24)$$

Szenario II b ( $T_i = T_e = 20 \text{ eV}$ ):

$$\rho_K \approx 0,997$$
  
 $a_{10} = 30,9845; a_{11} = 26,9923; a_{12} = 0,886383$ 
  
 $a_{20} = 45,9385; a_{21} = 33,5105; a_{22} = 1,29009$ 

$$a_{30} = 84,6406; a_{31} = 78,4526; a_{32} = 1,34427$$
  
 $\frac{\langle v_x^i \rangle}{c_s} \approx 1,12; \ \widetilde{\sigma}^2 \approx 0,091; \ \xi_b \approx 1,34$ 
(5.25)

Szenario II c ( $T_i = T_e = 30 \text{ eV}$ ):

$$\rho_{K} \approx 0,995$$

$$a_{10} = 32,5466; a_{11} = 31,6206; a_{12} = 0,817464$$

$$a_{20} = 48,5737; a_{21} = 38,1461; a_{22} = 1,21811$$

$$a_{30} = 92,3165; a_{31} = 86,6218; a_{32} = 1,35768$$

$$\frac{\langle v_{x}^{i} \rangle}{c_{s}} \approx 1,11; \tilde{\sigma}^{2} \approx 0,094; \xi_{c} \approx 1,32$$
(5.26)

Zusätzlich sind die Werte von  $\langle v_x^i \rangle$ ,  $\tilde{\sigma}^2$  sowie  $\xi$ , wie sie in den vorherigen Abschnitten definiert wurden, mit angeben.

Als erstes Resultat sieht man den Werten der Fitparameter, wenn überhaupt, nur eine sehr schwache, direkte Temperaturabhängigkeit an. Besonders augenscheinlich ist dies an den Werten für den Exponenten  $a_{i2}$ ; i = 1, 2, 3. Neben der geringen Variation mit den absoluten Temperaturwerten korrelieren sie auch wieder mit den Werten von  $\xi$ . Die Vermutung (5.20) aus Abschnitt 5.2.1

$$a_{12} \approx \xi_s; \ a_{22} \approx \xi_s; \ a_{32} \approx \frac{1}{2} \cdot \xi_s \ ; s = a, b, c$$
 (5.27)

scheint damit weiter erhärtet. Auch fällt die Temperaturunabhängigkeit bei genauerer Betrachtung der Werte  $\langle v_x^i \rangle / c_s$  und  $\tilde{\sigma}^2$  ins Auge. Bezieht man noch den Wert (5.21) mit in die Bewertung mit ein, so scheint die Schichtkinetik tatsächlich nur vom Verhältnis  $T_e/T_i$  abzuhängen (vgl. auch Formeln (4.78), (4.80) und (4.82)). Im vorliegenden Fall wird dieser Sachverhalt in der Definition (5.16) durch die inhärente Normierung der Geschwindigkeiten mit  $c_s$  herausgearbeitet. Um dies weiter zu unterstreichen, werden die Szenarios II a-c nochmals statistisch beleuchtet. Dazu werden neue Histogramme diesmal für  $v_x^i/c_s$  angelegt. Damit wird das Ergebnis direkt mit Emmert et. al [2] (Abb. 6) vergleichbar. Zusätzlich ist ein Histogramm aus Bereich 3 gezeigt für den das Temperaturverhältnis aus Szenario II b geändert ( $T_i = 20$  eV;  $T_e = 40$  eV) wurde.

Abbildung (5.12) zeigt, dass die Renormierung die Verteilungen nahezu deckungsgleich übereinander verlagert. Damit ist die Unabhängigkeit der Schichtkinetik von den absoluten Temperaturwerten belegt. Es kommt als auch bei der Tree-Code Simulation nur auf das Verhältnis  $T_e/T_i$ an. Zusammen mit den fast gleichen Werten für  $\langle v_x^i \rangle/c_s$  und  $\tilde{\sigma}^2$  lässt sich spekulieren, ob die ohnehin schon geringen Abweichungen in den Fitparametern nur statistisches Rauschen, erzeugt durch die numerische Fitprozedur, sind. Dies lässt sich untersuchen, wenn man die Fitfunktion mit den Fitparametern für Szenario II a ( $T_i = T_e = 15$  eV) mit der Schallgeschwindigkeit für



Abbildung 5.12: Histogramme über  $v_x^i/c_s$ . Zusätzlich zeigt das dunkelgrüne Histogramm eine Verteilung analog Szenario II b mit  $T_e/T_i = 2$ 

Szenario II b ( $T_i = T_e = 20 \text{ eV}$ ) renormiert und sie dann zusammen mit dem Histogramm für Szenario II b abbildet. Man setzt also die Summe (5.16) aus Funktionen der Art

$$f_{a_{j_0},a_{j_1},a_{j_2}}^{(j)}(v_x^i) = \frac{1}{c_s} \mathcal{N}(a_{j_0},a_{j_1},a_{j_2}) \cdot \left(\frac{v_x^i}{c_s}\right)^{a_{j_0}} \exp\left\{-a_{j_1} \left(\frac{v_x^i}{c_s}\right)^{a_{j_2}}\right\}$$

zusammen, wobei die Werte  $a_{j_0}, a_{j_1}, a_{j_2}$ ; j = 1, 2, 3 den obigen zu Szenario II a entsprechen. Die Schallgeschwindigkeit  $c_s$  hingegen ist die zu Szenario II b passende. Diese Funktion wird zusammen mit den Simulationsdaten von Szenario II b in (5.13) dargestellt.

An der hohen Güte der Anpassung ( $\rho_K \approx 0,996$ ) sieht man, dass die Unterschiede in den Fitparametern wie vermutet nur ein statistisches Rauschen waren. Die Funktionen für die Szenarios II a, b und c unterscheiden sich also de facto nur durch die rein quellenabhängige Normierung mit  $c_s$ , aber nicht durch die eigentlichen Fitwerte. Die Temperaturabhängigkeit der Verteilung ist also erwartungsgemäß nur für das Temperaturverhältnis  $T_e/T_i$ , nicht aber für die Einzelwerte  $T_i$  und  $T_e$  nachweisbar.

Auch die hier vorgestellten Szenarios werden später (Abschnitt 5.4.1) genauer in den Kontext bestehender Theorien eingereiht.

#### 5.2.1.3 Vergleich mit der analytischen Theorie

Um die, im Zuge der Diskussion bezüglich Abbildung (5.9) aufgeworfenen Diskrepanzen zwischen der analytischen Lösung von Emmert et. al [2] (vgl. Anhang D) und den hier erzielten Ergebnissen final aufzuklären, wurde noch ein weiteres Simulationsszenario mit der Quellbedingung nach Emmert et. al entwickelt.



*Abbildung 5.13:* Fitfunktion mit neuer Schallgeschwindigkeit normiert aus Szenario II a angelegt an die Werte aus Szenario II b

Es unterscheidet sich von den bisher vorgestellten nur durch die Quelle. Sie wird nun als Volumenquelle implementiert und Teilchen werden zu Beginn der Simulation räumlich gleichverteilt im Bereich zwischen  $[0-0, 5] l_x$  generiert. Diese räumliche Form der Quellregion entspricht also einer konstanten Quellen-Form Funktion h(x) (vgl. Abschnitt 5.2.1). Wie in [2] belegt wird, ist das Ergebnis jedoch unabhängig von h(x) und damit ist die Wahl der Länge Quellregion unerheblich.

Die entscheidenden Geschwindigkeitsverteilungen der Teilchenquelle werden nun gemäß den Vorgaben von Emmert et. al angesetzt. Das bedeutet, die Ionen werden durch einen vorzeichenbehafteten Fluss generiert (vgl. Abb. 2 in [83] oder Abb. (5.14)). Konkret bedeutet dies, dass die Ionenverteilungen in *x*-Richtung gemäß

$$f_{i}(v_{x}) = \frac{m_{i}}{T_{i}} \cdot v_{x} \exp\left\{-\frac{m_{s}v_{x}^{2}}{2T_{i}}\right\} ; v_{x} \in \mathbb{R}^{+}$$

$$f_{i}(v_{y}) = f_{i}(v_{z}) = \mathcal{N}\left(0, \frac{T_{i}}{m_{i}}\right)$$
(5.28)

gegeben ist. Damit unterscheidet sich die Quellverteilung in erster Instanz nicht von der ursprünglichen (4.50). Der entscheidende Unterschied besteht nun darin, dass bei der Hälfte der erzeugten Ionen das Vorzeichen von  $v_x$  auf  $-v_x$  abgeändert wird (siehe hierzu Abb. (5.14) oder auch Diskussion in Stangeby [3] Abschnitt 10.7).



Abbildung 5.14: Auf 1 normierte Geschwindigkeitsverteilungen verschiedener Teilchenquellen mit den physikalischen Parametern aus Szenario I. Zur näheren Erklärung siehe nebenstehende Erläuterung

*Erläuterung:* Die in Abbildung (5.14) gezeigten Geschwindigkeitsverteilungen der Teilchenquelle entsprechen

- 1. **Standard Fluss:** Quelle wie in Gleichung (4.50) beschrieben. Dies ist die Quelle, mit der alle gezeigten Simulationsergebnisse außerhalb dieses Abschnittes 5.2.1.3 erzielt wurden
- 2. Emmert et. al: Quelle aus der analytischen Theorie, wie sie in der Arbeit von Emmert et. al [2] angenommen wird
- 3. **Bissell und Johnson:** Quelle aus der analytischen Theorie, wie sie in der Arbeit von Bissell und Johnson [79] angenommen wird

Die Elektronen werden nun nichtmehr mit einem Fluss generiert sondern werden als isotrop thermalisiert implementiert (vgl. Ende Abschnitt I in [2]).

$$f_e(v_x) = f_e(v_y) = f_e(v_z) = \mathcal{N}\left(0, \frac{T_e}{m_e}\right)$$
(5.29)

Als Verifikationsszenario wird Szenario IV a (siehe Tabelle (4.3)) simuliert. Zum Vergleich wird die Verteilung direkt vor der Wand im Bereich  $[79 - 80] \lambda_D$  und im Quellbereich  $[0 - 3] \lambda_D$  observiert. Diese Referenzpunkte bieten sich an, da die Wand und die Quelle sowohl in der Theorie als auch der Simulation, im Gegensatz etwa zur Schichtkante, eindeutig definiert sind. Um mit den Funktionen nach Emmert (Glg. 45 in [2] sowie Anhang D) adäquat abgleichen zu können, müssen diese, wie in Darstellung (5.15) geschehen, auf 1 normiert werden. Zusätzlich ist darauf zu achten, dass man die Werte für die Potentialdifferenz bis zur Schichtkante (Wert für  $\Psi_1$  in [2]) beziehungsweise bis zur Wand (Wert für  $\Psi_2$  in [2]) der Simulation und nicht der Lösung von Emmert entnimmt, da diese absolut voneinander abweichen können. Wobei die kanonische, dimensionslose Notation

$$\psi := -\frac{e\,\phi}{T_e} \tag{5.30}$$

Verwendung findet.



Abbildung 5.15: Simulationsergebnis mit Emmert-Quelle sowie analytische Lösung vor der Wand und in der Quellregion (Szenario IV b;  $T_e/T_i = 1$ )



**Abbildung 5.16:** Simulationsergebnis mit Emmert-Quelle sowie analytische Lösung vor der Wand und in der Quellregion (Szenario IV a;  $T_e/T_i = 0, 5$ )

Anhand den in Abbildungen (5.15) und (5.16) dargestellten Ergebnissen sieht man nun, dass der Einsatz der entsprechenden Quelle wie erwartet dieselben Ergebnisse wie die analytische Theorie von Emmert et. al liefert. Bemerkenswert ist es auch, dass die Verteilung in der Quellregion (Abb. (5.15)) eine Gaußglocke darstellt. Sie ist damit signifikant anders als die Quellverteilung nach Emmert (Abb. (5.14)). Diese Eigenheit des Emmert-Modells wird auch ausführlich in Stangeby [3] (Abschnitt 10.7) diskutiert.

Die in den Darstellungen (5.15) sowie (5.16) ersichtlichen, geringen Unterschiede zwischen den analytischen Kurve und der Verteilung aus der Simulation sind dabei auf zwei Hauptgründe zurückzuführen. Zum Einen handelt es sich sicher zu einem gewissen Grad um das übliche statistische Rauschen, zum Anderen ist zu bedenken, dass die Lösung von Emmert an einem nulldimensionalen Punkt entnommen wird. In der Simulation müssen jedoch aus kleinen Bereichen, besagten  $[79 - 80] \lambda_D$  vor der Wand oder  $[0 - 3] \lambda_D$  im Quellbereich, Teilchen für eine Stichprobe entnommen werden.

Als Ergebnis der hier durchgeführten Verifikation bleibt festzuhalten, dass die Unterschiede zwischen den hier hauptsächlich diskutierten Fällen und der analytischen Theorie offensichtlich auf die abweichenden Quellbedingungen im Geschwindigkeitsraum zurückzuführen sind. Damit bestätigt das hier präsentierte Ergebnis die Diskussion in Abschnitt V von [79].

### 5.2.2 Stößigkeit des Systems

Eine Stärke von Tree-Codes ist es, Coulomb-Nahfeld-Wechselwirkungen (Teilchenabstand  $d \leq \lambda_D$ ) intrinsisch mit zu berücksichtigen. Das heißt, der Einfluss von Stößen muss auch im Hinblick auf zukünftige Anwendungen (siehe Abschnitt 6) separiert bewertet werden. Dazu wird exemplarisch Szenario I mit den entsprechenden Formeln aus [61] gegengerechnet.

Coulomb Logarithmus : 
$$\log(\Lambda_{ii}) := 23 - \log\left(\frac{1}{2T_i} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot 10^{-6} n_e}{T_i}}\right) \approx 20,5(5.31)$$

Stoßfrequenz : 
$$\nu_{\parallel}^{i|i} := 6, 8 \cdot 10^{-14} \frac{n_i \log(\Lambda_{ii})}{T_i^{\frac{3}{2}}} \approx 195 \frac{1}{s}$$
 (5.32)

Mittlere freie Weglänge : 
$$\langle l \rangle := \frac{\langle v \rangle}{\nu_{\parallel}^{i|i}} = \frac{\sqrt{\frac{T_i}{m_i}}}{\nu_{\parallel}^{i|i}} \approx 449 \text{ m}$$
 (5.33)

Setzt man dieses Ergebnis mit der Systemlänge ins Verhältnis, so ergibt sich

$$\nu * := \frac{l_x}{\langle l \rangle} \approx 3,7 \cdot 10^{-4} \tag{5.34}$$

Dabei wurde auf die Notation von [21] zurückgegriffen. Offensichtlich gilt

$$\nu * \ll 1 \tag{5.35}$$

das heißt, das System ist de facto stoßfrei, was sich schon im Vergleich des Geschwindigkeitszuwachses (5.11) mit der stoßfreien Theorie von Emmert et. al [2] andeutet. Auch visuell ist dies nachweisbar. Der Ionenphasenraum (5.7) lässt sich in eine Darstellung (5.17), die den Verlauf der kinetischen Energie der Ionen in x-Richtung gegenüber der Systemlänge zeigt, transformieren.

Damit ist es möglich, den Gewinn an kinetischer Energie mit dem Potentialverlauf (4.23) zu vergleichen. Dazu wird dieser zunächst invertiert, um den Verlust der Ionen an potentieller Energie zu erhalten

$$\frac{e\phi}{T_e} \longrightarrow -\frac{e\phi}{T_e} \tag{5.36}$$

und dann dieser Wert mittels einer Integrationskonstante  $K_{tr}$  an die langsamsten Ionen angepasst

$$-\frac{e\phi}{T_e} \longrightarrow -\frac{e\phi}{T_e} + K_{tr}$$
 (5.37)



Abbildung 5.17: Kinetische Energie der Ionen im Vergleich mit dem Potentialverlauf (4.23) (Szenario I)

Es wird an Abbildung (5.17) deutlich, dass die Ionenbeschleunigung fast identisch der Änderung des Potentials folgt. Gerade im Bereich der Schichtkante ist dies sehr deutlich. Damit ist belegt, dass die Ionen tatsächlich viskositätsfrei durch das Simulationsgebiet laufen. Im Gegenteil, in der Vorschicht, scheint die Zunahme an kinetischer Energie sogar größer als der Potentialgradient. Dies ist ein weiteres Indiz auf die schon thematisierte adiabatische Abkühlung (siehe Diskussion zu Abb. (5.8)). Die Ionen gewinnen Teile ihrer gerichteten kinetischen Energie aus ihrer thermischen Bewegung.

## 5.2.3 Erhöhen der Stößigkeit

Wie in Kapitel 25 in Stangeby [3] ausführlich diskutiert wird, ist prinzipiell immer eine vollständige kinetische Behandlung der Schichtkante notwendig. Wo diese Behandlungen für eine stoßfreie Vorschicht schon aufwendig [2, 79] und deshalb selten sind, so fehlen sie gerade für Vorschichten mit selbstkonsistenter Wechselwirkung zwischen Ionen nahezu gänzlich. Man nimmt an, dass diese Art von Reibung keinen entscheidenden Einfluss auf die Schichtkinetik hat (siehe Stangeby [3] S. 630). Eine Annahme, die nun mit dem hier vorgestellten, neuen Modell numerisch untersucht werden kann.

Ein Vorteil von Tree-Codes liegt in der generellen Fähigkeit, Coulomb-Stöße inhärent mit zu simulieren. Damit ist es möglich, den Einfluss von Stößen auf das Schichtmodell zu untersuchen. Um dies zu realisieren, wird der Wert von  $\nu *$  physikalisch erhöht. Mit den Parametern für Szenario III (Tabelle (4.2)) ist

$$\nu * \approx 0,7 \tag{5.38}$$

und das Szenario lässt sich als für diesen Zweck ausreichend stößig interpretieren. Zunächst

wird der Potentialverlauf mit der in den Abschnitten 4.7 und 4.6.1 vorgestellten Standard-Methode untersucht. Man identifiziert die Schichtkante bei  $x_{se} = 794\lambda_D$  und erhält somit einen Potentialabfall in der Schicht von

$$\frac{e\Delta\phi}{T_e} \approx 2,59 \pm 0,08 \tag{5.39}$$

Dieser Wert weicht nur um  $\sim 1,2\%$  von dem von Emmert et. al ab. Damit hat man erneut einen Beleg, dass der Potentialabfall in der Schicht weder von der Plasmadichte noch von den absoluten Werten von  $T_i$  und  $T_e$  abhängt. Eindringlicher wird die geringe Abhängigkeit von Ionen-Ionen-Stößen, wenn man die Potentialverläufe von Szenario I (stoßfrei) und Szenario III (stößig) vergleicht. Dazu sind in Abbildung (5.18) die beiden Potentialverläufe direkt vor der Wand gezeigt.



Abbildung 5.18: Potentialverläufe vor der Wand. Szenario I (stoßfrei) und Szenario III (stößig)

Die Potentiale wurden dabei zur besseren Vergleichbarkeit mit einer entsprechenden Integrationskonstanten bei  $x = (l_x - 40\lambda_D)$  auf 0 gesetzt. Man sieht, dass sich nahezu nichts an den Potentialen an der Schichtkante und der Wand durch die höhere Stößigkeit ändert. Damit ist der verschwindende Einfluss der Ionen-Ionen-Stöße auf diese Größen, wie er schon von J. T. Scheuer und G. A. Emmert [24] gefunden wurde, bestätigt. Dennoch behebt der Tree-Code eine Schwäche der Untersuchungen von J. T. Scheuer et. al. Wie in der Einleitung von [24] erwähnt wird, wäre anstatt des verwendeten *Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)-Operators* ein Fokker-Planck-Term besser geeignet, um die Coulomb-Stöße zu berücksichtigen. Diese Lücke wird hier geschlossen, da man davon ausgehen kann, dass die Stößigkeit, wie sie durch Tree-Codes behandelt wird, einem Fokker-Planck-Operator entspricht. Damit ist geklärt, dass der Fehler durch die binäre Behandlung der Ionen-Ionen-Wechselwirkungen in [24] gering ist und auch ein aufwendigerer Stoßoperator die Ergebnisse in [24] nicht ändert. Weiterführende, direkte Vergleiche mit der zitierten Arbeit sind Abschnitt 5.4.2 zu entnehmen. Um hier den Einfluss der Stößigkeit im Kontext vorhergehender Simulationen weiter zu beleuchten, untersucht man zunächst die kinetischen Energien der Teilchen analog dem Verfahren, welches schon zu Abbildung (5.17) führte.



*Abbildung 5.19: Kinetische Energie der Ionen im Vergleich mit dem Potentialverlauf (4.23) (Szenario III)* 

Im Unterschied zu (5.17) zeigt (5.19) einen Abschnitt von  $x \approx 200\lambda_D$  bis  $x \approx 500\lambda_D$ , in dem der Potentialabfall teilweise deutlich stärker ist als der Zugewinn an kinetischer Energie. Dies ist ein Indiz für die innere Reibung, welche nun im System herrscht. Näher an der Wand  $(x > 600\lambda_D)$ , wo die Dichte des Systems geringer ist, ist die Steigung von Potential und kinetischer Energie der Ionen wieder annähernd gleich.

Abschließend wird noch die Ionenkinetik in ihrer Gänze beleuchtet. Hierbei fällt sofort auf, dass der Ionenphasenraum (5.20) keinen Wirbel mehr in der Quellregion aufweist. Das heißt, etwaige Instabilitäten induziert durch die Randbedingungen scheinen für dichtere, kältere Szenarios weiter an Einfluss zu verlieren. Dies könnte auch erklären, warum in vorangegangenen Publikationen [57] nicht über derartige Probleme berichtet wurde. Auch fällt ein geringer Anteil von Ionen mit negativer Geschwindigkeit in Bereich 1 auf (schwarze Verteilung in Abb. (5.21)). Da die Ionen mit rein positiver Geschwindigkeit generiert werden, ist dies ein weiterer Hinweis auf die Stößigkeit des Systems.

Prinzipiell ändert sich jedoch an der Ionenkinetik weiter im System nicht viel, wie ein Abgleich der Histogramme in Abbildung (5.8) und denen in (5.21) zeigt. Um auch für Szenario III eine Verteilung direkt an der Schichtkante untersuchen zu können, wurde den Bereichen 1-3 (5.4) ein weiterer, der neuen, längeren Geometrie angepasster hinzugefügt

Bereich 4 : 
$$[0,988-0,994]l_x \stackrel{\text{Szenario III}}{\approx} [790-795]\lambda_D$$
 (5.40)



Abbildung 5.20: Phasenraum der Ionen (Szenario III)Abbildung 5.21: Ionengeschwindigkeitsvertei-<br/>lungen in den Bereichen 1, 2 und 4

In diesem soll nun erneut ein Vertreter der Funktionenklasse (5.16) angefitet werden.



*Abbildung 5.22:* Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante (Szenario III) mit numerischen Fit der Art (5.16) sowie Kurve nach Emmert et. al [2]

Wie Abbildung (5.22) zu entnehmen ist, gelingt ein Anpassen einer entsprechenden Funktion erneut mit n = 3. Die Fitparameter sowie die in Abschnitt 5.2.1 definierten Größen  $\tilde{\sigma}^2$ ,  $\xi$  und  $\rho_K$  ergeben sich diesmal zu

$$\rho_K \approx 0,998$$

$$a_{10} = 26, 1518; \ a_{11} = 8, 70115; \ a_{12} = 2, 31387$$

$$a_{20} = 20, 159; \ a_{21} = 6, 01433; \ a_{22} = 2, 18829$$

$$a_{30} = 13, 643; \ a_{31} = 4, 59637; \ a_{32} = 1, 57649$$

$$\frac{\langle v_x^i \rangle}{c_s} \approx 1, 3; \ \tilde{\sigma}^2 \approx 0, 088; \ \xi \approx 1, 78$$
(5.41)

Zusätzlich ist in Darstellung (5.22) wieder zur Einordnung eine Kurve nach Emmert et. al [2] (Glg. (45)) dargestellt. Der direkte Vergleich mit den erzielten Simulationsergebnissen ist hier jedoch schwieriger, da die Analyse von Emmert et. al sich auf stoßfreie Systeme bezieht. Vergleicht man nun die Werte für die Fitparameter mit den stoßfreien Szenarios I und II, so sieht man, dass die Fitparameter deutlich kleiner ausfallen. Dies ist dem flacheren Anstieg der Verteilung in (5.22) geschuldet. Auch lässt sich hier der Wert für  $\xi$  nicht mehr so zweifelsfrei mit den Parametern  $a_{12}$ ,  $a_{22}$  und  $a_{32}$  identifizieren. Anders verhält es sich mit numerischen Werten für Varianz und Mittelwert der Verteilung. Die Breite der Verteilung  $\tilde{\sigma}^2$  hat sich relativ zur Schallgeschwindigkeit fast gar nicht verändert. Auch ist der mittlere Drift immer noch in der Größenordnung  $\langle v_x^i \rangle \approx 1, 1 c_s$  bis  $1, 3 c_s$ . Diese Größen scheinen also unabhängig von der relativen Stößigkeit  $\nu*$ . Damit bestätigt die Simulation die Eingangs erwähnte Vermutung. Das selbstkonsistente System stellt sich also an der Schichtkante, im Rahmen der numerischen Auflösung, immer gleich ein. In allen Fällen ist das kinetische Bohm-Kriterium (4.36) erfüllt. So ergibt sich im vorliegenden Fall für Szenario III

$$\int_{0}^{\infty} \frac{f_{se}(v_x^i)}{(v_x^i)^2} \, dv \approx 3,51 \cdot 10^{-9} \, \frac{\mathbf{s}^2}{\mathbf{m}^2} \, \le \, \frac{m_i}{T_e} \approx 1,04 \cdot 10^{-8} \, \frac{\mathbf{s}^2}{\mathbf{m}^2} \tag{5.42}$$

### 5.2.4 Neutralgasreibung

Eine andere Möglichkeit, Stoßeffekte in die Betrachtungen miteinzubeziehen, ist es, einen Neutralgashintergrund zu berücksichtigen, mit dem die Simulationsteilchen interagieren. Zu diesem Zweck kann ein Monte-Carlo Hintergrundreibungsmodell genutzt werden welches im Rahmen dieser Arbeit ursprünglich für Coulomb-Reibung entwickelt wurde. Um diese prinzipielle Anwendung zu illustrieren, soll in diesem Abschnitt eine entsprechende konzeptionelle Studie durchgeführt werden. Dazu werden zunächst kurz die aus der geänderten Physik notwendigen Modifikationen des Stoßalgorithmus erläutert und anschließend Anwendungsbeispiele gezeigt.

#### 5.2.4.1 Modifikationen des Stoßoperators

Anders als bei der Anwendung auf Coulomb-Stöße ist bei der Neutralgasreibung nicht davon auszugehen, dass es permanent zu Interaktionen zwischen Simulationsteilchen und Hintergrund kommt. Es handelt sich vielmehr um echte, binäre Stöße. Die Hauptaufgabe ist es also, einen Term für die Stoßwahrscheinlichkeit in einem Zeitintervall  $0 < t \leq \tau$  zu entwickeln. Um dies zu tun, kann man sich an Abschnitt 1.3.5.1 in [84] orientieren. Darin wird die Wahrscheinlichkeit für mindestens einen Stoß auf der Wegstrecke  $0 < l \leq l_0$  mittels der Verteilungsfunktion

$$\mathcal{P}(l \le l_0) = 1 - \exp\left\{-\frac{l_0}{\langle l \rangle}\right\}$$
(5.43)

benannt. Hierbei ist  $\langle l \rangle$  wie gewohnt die mittlere freie Weglänge. Diese Verteilungsfunktion lässt sich nun über die kanonischen Definitionen

$$l_0 = v \cdot \tau \text{ und } \langle l \rangle = \frac{v}{\nu}$$
 (5.44)

auf eine Wahrscheinlichkeit für mindestens einen Stoß im Zeitintervall  $0 < t \leq \tau$  umschreiben

$$\mathcal{P}(t \le \tau) = 1 - \exp\left\{-\nu \cdot \tau\right\} \tag{5.45}$$

Dabei wurde mit  $\nu$  die Stoßfrequenz für den zu untersuchenden Reibungsprozess eingeführt. Mit der wichtigen Bedingung

$$\nu \cdot \tau \ll 1 \tag{5.46}$$

ergibt sich in erster Näherung

$$\mathcal{P}(t \le \tau) \doteq \nu \cdot \tau \tag{5.47}$$

In der Forderung (5.46) sind nun prinzipiell zwei grundlegende Näherungen vereinigt:

- i.) Es geschieht nur 1 Stoß während  $0 < t \leq \tau$ .
- ii.) Der Stoß geschieht zu Ende des Zeitintervalls.

Mit dieser Argumentation lässt sich über Gleichung (5.47) nun die gesuchte Stoßbedingung wie folgt simulieren:

Als erstes wird eine gleichverteilte Zufallszahl  $\eta=\mathcal{U}(0,1)$  bestimmt, mit deren Hilfe man schließt

$$\eta \leq \nu \cdot \tau \quad \Rightarrow \quad \text{Stoß im Zeitintervall } 0 < t \leq \tau$$
$$\eta > \nu \cdot \tau \quad \Rightarrow \quad \text{kein Stoß im Zeitintervall } 0 < t \leq \tau \tag{5.48}$$

**Ladungsaustausch** Will man nun einen konkreten Neutralgaseffekt simulieren, muss man die Stoßfrequenz  $\nu$  dementsprechend spezialisieren. Dazu bietet es sich an, diese über die *Reaktionsratenkoeffizienten*  $\langle \sigma v \rangle$  (siehe Abschnitt 1.8. in [85] oder Stangeby [3] Glg. (10.14)) auszudrücken.

$$\nu = \langle \sigma \, v \rangle \cdot n_b \tag{5.49}$$

wobei  $n_b$  die Dichte des Hintergrundmediums ist. Da man es bei der kinetischen Behandlung stets mit wohldefinierten, monoenergetischen Teilchen zu tun hat, lassen sich die Werte aus [85] zur weiteren Konkretisierung heranziehen. Etwa liest man für den *Ladungsaustausch* (Abschnitt 3.1.8 in [85]) mit einem thermalisierten Wasserstoffhintergrund der Temperatur  $T_b$  (Graph auf S. 129 in [85]) ab

$$\langle \sigma v \rangle \approx 10^{-13} \, \frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{s}}$$
 (5.50)

Der Stoßalgorithmus wird nun also wie folgt angewendet, um den Ladungsaustausch des Simulationsplasmas mit neutralem, thermalisiertem Wasserstoff (Temperatur  $T_b$ ; Dichte  $n_b$  und Teilchenmasse  $m_b = m_p$ ) zu simulieren. Für jedes Simulationsion

- I.) Bestimmt man eine Zufallszahl  $\eta = \mathcal{U}(0, 1)$ .
- II.) Entscheidet anhand des Kriteriums (5.48):

$$\begin{split} \eta &\leq 10^{-13} \; \frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{s}} \; n_b \cdot \tau \quad \Rightarrow \quad \mathrm{Sto} \beta \\ \eta &> 10^{-13} \; \frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{s}} \; n_b \cdot \tau \quad \Rightarrow \quad \mathrm{kein} \; \mathrm{Sto} \beta \end{split}$$

ob das Teilchen stößt oder nicht.

III.) Falls ein Stoß stattfindet, generiert man eine Hintergrundteilchengeschwindigkeit  $\vec{v}_b$  aus einer Gauß-Verteilung

$$v_b^{(i)}$$
 =  $\mathcal{N}(0, \sigma^2); i = x, y, z$   
wobei:  $\sigma^2 = \frac{T_b}{m_b}$ 

IV.) Tauscht die Geschwindigkeiten von Simulationsteilchen und Hintergrundteilchen aus.

<u>Bemerkung</u>: Für die Simulationen, deren Ergebnisse im folgenden Abschnitt 5.2.4.2 gezeigt werden, wurde obiger Algorithmus alle 20 Zeitschritte gestartet. Damit erreicht man, dass nicht in jedem Zeitschritt eine Zufallszahl  $\eta$  generiert werden muss.

Es gilt also  $\tau = 20 \cdot \Delta t$ . Da  $\Delta t$  stets (vgl. Tabellen (4.1) und (4.2)) in der Größenordnung  $\Delta t \sim 10^{-12} - 10^{-11}$  s liegt, ist damit immer noch die Bedingung (5.46) erfüllt.

### 5.2.4.2 Stößige Schicht

Der im letzten Paragraphen vorgestellte Reibungsoperator soll im Folgenden an Szenario II b (Tabelle (4.2)) getestet werden. Um den Programmverlauf etwas abzukürzen und somit die Auswirkungen des Stoßmodells auf die Simulationszeit abzufedern, werden nur noch  $N_i = N_e =$   $5 \cdot 10^5$  Simulationsteilchen eingesetzt. Damit verringert man die Auflösung lediglich auf den immer noch sehr guten Wert von  $\mathcal{A} \approx 430 \ 1/\lambda_D^3$  (vgl. Abschnitt 6.2).

Der neutrale Hintergrund wird als ein Wasserstoffgas der Temperatur  $T_b = 20$  eV und variierender Dichte  $n_b$  mit einbezogen. Als erstes Ergebnis werden die veränderten Potentialverläufe in (5.23) abgebildet. Als Referenzpotential wird zusätzlich nochmals der Potentialverlauf für das originale Szenario II b ohne Hintergrundreibung ( $n_b = 0$ ) gezeigt.



Abbildung 5.23: Potentialverläufe bei verschiedenen Neutralgasdichten  $n_b$  (Szenario II b;  $T_b = 20 \text{ eV}$ ) mit ansteigendem Potentialabfall in der Vorschicht  $\xi$ 

Anhand von Darstellung (5.23) ist zu sehen, wie das System die mit der Dichte ansteigende Reibung der Ionen durch stärkere Potentialgradienten in der Vorschicht kompensiert. Damit werden die Ionen bis zur Schichtkante ausreichend beschleunigt. Dieses Ergebnis ist deckungsgleich mit dem von J. T. Scheuer und G. A. Emmert [24]. Wie gut der zusätzliche Potentialabfall in der Vorschicht  $\xi$  zur Theorie passt, ist dabei Tabelle (5.1) zu entnehmen.

Dichte $n_b$	$\nu *$	$\xi_{Sim}$	$\xi_{Theo} \approx \log\left(\nu*\right)$
$10^{21} \text{ m}^{-3}$	3,84	1,3	1,34
$10^{22} \text{ m}^{-3}$	38,4	3,5	3,64

**Tabelle 5.1:** Zusätzlicher Potentialgradient in der Vorschicht  $\xi$  bei Neutralgasreibung

Wobei  $\nu$ \* analog zu (5.34) die Stößigkeit des Systems definiert. Hier gilt

$$\nu * = 2 \cdot \frac{l_x}{v_{therm}/\nu} = 2 \cdot \frac{l_x \cdot \nu}{\sqrt{T_i/m_i}}$$

Mit der Stoßfrequenz  $\nu$  aus Gleichung (5.49). Zusätzlich wurde berücksichtigt, dass die Impulsausstausch*rate* um den Faktor 2 größer ist als die Stoßfrequenz. Wendet man sich nun der

veränderten Ionenkinetik zu, so liegt es nahe, wieder zuerst den Ionenphasenraum zu untersuchen (Abb. (5.24)).



Abbildung 5.24: Ionenphasenraum bei  $n_b = 10^{21} m^{-3}$  (Szenario II b;  $T_b = 20 \text{ eV}$ )

Was bei der entsprechenden Betrachtung sofort auffällt, ist, dass es nun durchweg einen Anteil Ionen mit negativer Geschwindigkeit  $v_x^i$  gibt. Dies bezeugt die Stößigkeit des Plasmas im gesamten Systembereich  $x \in [0, l_x]$ . Ein wichtiger Umstand, da er zeigt, dass mit der vorgestellten Methode nicht mehr zwischen stößiger Vorschicht und stoßfreier Schicht unterschieden werden muss. Die Neutralgasreibung findet im vorliegenden Szenario überall, auch in der Schicht selber, statt.

Eine genauere Analyse der Ionengeschwindigkeitsverteilungen offenbart, dass in der Mitte (Bereich 2 (5.4)) das System in eine driftende Maxwell-Verteilung übergegangen ist. Dies ist in Abbildung (5.25) mit dem Fit der Art (5.51)

$$f_{fit}(v_x^i) = \left(\frac{1}{2\pi a_0}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left\{-\frac{(v_x^i - a_1)^2}{2 a_0}\right\}$$
(5.51)

herausgearbeitet.

Die Fitparameter  $a_0$  und  $a_1$  ergeben sich zu

$$a_0 \approx 1,91 \cdot 10^9 \frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^2} \Rightarrow T_i \approx 19,94 \,\mathrm{eV}$$

$$a_1 \approx 2,22 \cdot 10^4 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \approx \frac{1}{3} \, c_s \qquad (5.52)$$

Man sieht, dass sich die Temperatur der Ionen nahezu exakt der Hintergrundtemperatur angepasst hat. Anders verhält es sich mit der Verteilung an der Schichtkante (Darstellung (5.26)).



**Abbildung 5.25:** Ionengeschwindigkeitsverteilung im Bereich 2 bei  $n_b = 10^{21} m^{-3}$  (Szenario lung im Bereich 3 (Schichtkante) bei  $n_b = 10^{21} m^{-3}$  (Szenario II b;  $T_b = 20 \text{ eV}$ )  $10^{21} m^{-3}$  (Szenario II b;  $T_b = 20 \text{ eV}$ )

Hier gibt ein Fit der Art (5.51) das Histogramm nicht mehr zweifelsfrei wieder. Gerade im negativen Geschwindigkeitsbereich treten signifikante Abweichungen auf. Deshalb werden die numerischen Werte für die Varianz und den Mittelwert direkt aus den Rohdaten ermittelt. Sie ergeben sich zu

$$\sigma^{2} \approx 1,46 \cdot 10^{9} \frac{\mathrm{m}^{2}}{\mathrm{s}^{2}} \Rightarrow T_{i} \approx 15 \text{ eV}$$
$$< v_{x}^{i} > \approx 5,65 \cdot 10^{4} \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \approx 0,91 c_{s}$$
(5.53)

Es wird klar, dass die Flüssigkeitsnäherung des Bohm-Kriteriums (4.78) knapp nicht mehr erfüllt ist. Eine Überprüfung des kinetischen Bohm-Kriteriums (4.36) ist wegen des nun existenten Nulldurchgangs der Wahrscheinlichkeitsdichte nunmehr unmöglich.

Außerdem scheinen die Daten darauf hinzudeuten, dass die Ionenbeschleunigung von Bereich 2 zu Bereich 3 nicht ausschließlich durch das Potential erfolgt. Die einhergehende Abkühlung könnte ein Indiz dafür sein, dass ein Teil der dazu nötigen Energie aus der thermischen Bewegung der Ionen selbst kommt. Damit verhält sich das System ähnlich zu dem in Abschnitt 5.2 untersuchten. Weitere Erkenntnisse aus etwa der Kinetik sind Abschnitt 5.4.2 zu entnehmen, wo auch eine Diskussion und Gegenüberstellung erfolgt.

# 5.3 Das Bohm-Chodura-Kriterium

Für die praktische Anwendung in der Fusionsforschung sind oftmals Effekte, bei auf die Wand schräg einfallendem B-Feld zu untersuchen. So ist es beispielsweise eine einfache geometrische Maßnahme, durch Drehen der Felder die Teilchenflüsse auf Divertorplatten zu reduzieren.



**Abbildung 5.27:** Skizze der Schicht und Vorschicht sowie schematischer Potentialverlauf im Falle eines um den Winkel  $\alpha$  gedrehten B-Feldes

Um entsprechende Modelle zu generieren, dreht man wie in Skizze (5.27) angedeutet, das B-Feld um den Winkel  $\alpha \neq 0$  gegenüber der Oberflächennormalen.

Einer der Ersten, der ein entsprechendes System in Simulation und Theorie untersuchte, war Chodura [23]. Durch einen Ansatz in Störungsrechnung zeigte er, dass noch vor *upstream* der Schichtkante und dem dort unverändert gültigen Bohm-Kriterium (4.19) eine weitere Bedingung (*Chodura-Bedingung*) für die Driftgeschwindigkeit  $\vec{v}_{\parallel}$  der Ionen parallel  $\vec{B}$  gilt

$$v_{\parallel} \stackrel{!}{\geq} c_s \tag{5.54}$$

wobei hier

$$c_s = \sqrt{\frac{T_i + T_e}{m_i}} \tag{5.55}$$

die analog (4.20) verallgemeinerte isotherme Schallgeschwindigkeit [80] ist. Da, wie schon erwähnt, an der Schichtkante weiterhin das ursprüngliche Bohm-Kriterium (siehe Abschnitt 4.1) eingefordert wird, hat man zwei Bedingungen an zwei unterschiedlichen Stellen (Skizze (5.27))

1.

$$v_{\parallel} \ge c_s \tag{5.56}$$

*Chodura-Kriterium* an der sogenannten *magnetischen Vorschichtkante* (*magnetic presheath edge*).

2.

$$v_{\perp} \geqq c_s \tag{5.57}$$

Bohm-Kriterium an der Schichtkante.

Hatte man es bei einem senkrechten B-Feld ( $\alpha = 0^{\circ}$ ) nur mit zwei Raumbereichen, Vorschicht und Schicht, zu tun, so schließt man jetzt auf einen neu hinzukommenden. Dieser ist zwischen

den zwei zuvor genannten situiert und wird als *magnetische Vorschicht (magnetic presheath)* [23, 3, 70] bezeichnet. An der magnetischen Vorschichtkante (Übergang Vorschicht  $\rightarrow$  magnetische Vorschicht) muss dementsprechend (5.56) und an der Schichtkante (5.57) erfüllt sein. Folgerichtig postuliert man ein elektrisches Feld ( $\vec{E} \perp$  Wand) in der magnetischen Vorschicht, welches den Ionenfluss von  $\parallel \vec{B}$  auf  $\perp$  Wand dreht [70] beziehungsweise neu ausrichtet.

Im Potentialverlauf äußert sich dieses Feld mit einem gegenüber  $\alpha = 0^{\circ}$  stärkeren Abfall vor der Schichtkante, im vorliegenden Fall in *x*-Richtung (5.17). Bei der Begründung des eigentlichen Chodura-Kriteriums (5.56) ist der zuerst von Riemann [86] aufgezeigte, zeitunabhängige Weg der heute wohl gebräuchlichste. Aufgrund der Tatsache, dass er physikalisch wenig anschaulich ist und schon vielfach, nahezu unverändert, zusammengetragen wurde [70, 86, 87], soll die entspre-



Abbildung 5.28: Festlegung der Geometrie und Bezeichnungsweisen

chende Herleitung hier nur ideengebunden aufgezeigt werden. Dabei wird die gleiche Geometrie wie in [87] angewandt (siehe Abb. (5.28)).

Um stoßfreie Systeme zu untersuchen, startet man gemäß Riemann [86] mit den Ionenflüssigkeitsgleichungen für einen isothermen Fluss

$$\nabla \cdot (n_i \vec{v}) = 0 \tag{5.58}$$

$$m_i \mathcal{J}(\vec{v}) \cdot \vec{v} = e\left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}\right) - \frac{T_i}{n_i} \nabla n_i$$
(5.59)

Wobei  $\vec{v}$  hier die Ionenflussgeschwindigkeit und  $\mathcal{J}(\vec{v})$  deren Jacobi-Matrix [60] ist. Es wird von einfach geladenen Ionen  $q_i = e$  ausgegangen. Als entscheidender Unterschied zur Behandlung der Schichtkante ist hier zu beachten, dass sowohl Vorschicht als auch magnetische Vorschicht quasineutrale Bereiche beschreiben. Man setzt also für die Dichten in der magnetischen Vorschicht

$$n_i = n_e = n_s \, \exp\left\{\frac{e\phi}{T_e}\right\} \tag{5.60}$$

an. Mit der verallgemeinerten Gyrationsfrequenz

$$\vec{\omega} := \frac{e}{m_i} \vec{B} \tag{5.61}$$

und den dimensionslosen Rechengrößen (siehe Abb. (5.28))

$$\delta := \tan(\beta) = \frac{\omega_x}{\omega_y}; \ \zeta := \frac{x}{\rho_g} := \frac{\omega_y}{c_s} x$$

$$u := \frac{v_x}{c_s}; w := \frac{v_y}{c_s}; v := \frac{v_z}{c_s}; \chi := \frac{e\phi}{T_e} = -\log(u)$$
(5.62)

lässt sich das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} u - \frac{1}{u} \end{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial \zeta} = -v$$

$$u \frac{\partial w}{\partial \zeta} = v\delta$$

$$u \frac{\partial v}{\partial \zeta} = u - w\delta$$
(5.63)

verifizieren. In der magnetischen Vorschicht gelten hierbei die Randbedingungen

$$u \stackrel{\zeta \to -\infty}{\longrightarrow} u_0 = c \sin(\beta)$$
$$w \stackrel{\zeta \to -\infty}{\longrightarrow} w_0 = c \cos(\beta) \tag{5.64}$$

für Annäherung von rechts an die Vorschicht ( $\zeta \rightarrow -\infty$ ). Mit einer zunächst unbestimmten, dimensionslosen Strömungsgeschwindigkeit (Machzahl)

$$c := \frac{v_{\parallel}}{c_s} \tag{5.65}$$

parallel  $\vec{B}$  gewinnt man nun aus dem Gleichungssystem (5.63) einen Ausdruck für  $\frac{\partial w}{\partial \zeta}$  und integriert diesen mit den Grenzen (5.64)

$$\int_{-\infty}^{\zeta} \frac{\partial w}{\partial \zeta'} \, d\zeta' = w - w_0 \iff w = \frac{c + \frac{1}{c}}{\cos(\beta)} - \delta\left(u + \frac{1}{u}\right) \tag{5.66}$$

was man zusammen mit

$$v \stackrel{(5.63)}{=} -\frac{\partial u}{\partial \zeta} \left( u - \frac{1}{u} \right) \tag{5.67}$$

in den, von physikalischen Dimensionen befreiten, Ausdruck für die Energieerhaltung

$$u^{2} + w^{2} + v^{2} = 2\log\left(\frac{u}{u_{0}}\right) + c^{2}$$
(5.68)

einsetzt, um letztendlich bei

$$\left(\frac{1-u^2}{u}\right)^2 \left(\frac{\partial u}{\partial \zeta}\right)^2 = \underbrace{c^2 + 2\log\left(\frac{u}{u_0}\right) - u^2 - \left[\frac{c+\frac{1}{c}}{\cos(\beta)} - \delta\left(u+\frac{1}{u}\right)\right]^2}_{:=f(u)}$$
(5.69)

anzulangen. Damit lässt sich wie folgt rückwärts von der Schichtkante ( $\zeta = 0; u = 1$ ) in die magnetische Vorschicht ( $\zeta < 0; u < 1$ ) integrieren

$$\int_{\zeta}^{0} d\zeta' = \int_{u}^{1} \frac{1 - u'^{2}}{u'} (f(u'))^{-1/2} du'$$
  

$$\zeta(u) = -\int_{u}^{1} \frac{1 - u'^{2}}{u'} (f(u'))^{-1/2} du'$$
(5.70)

Es ist nun nachzurechnen, dass  $f(u_0) = f'(u_0) = 0$ . Somit degeneriert eine Taylor-Entwicklung von f(u) um  $u_0$  zu [70]

$$f(u) \stackrel{\text{\tiny def}}{=} \frac{1}{2} \left( u - u_0 \right)^2 \cdot f''(u_0) \tag{5.71}$$

wobei die entscheidende zweite Ableitung die Form

$$f''(u_0) = \frac{2\delta^2}{u_0} \left(\frac{1}{u_0^2} - 1\right) (c^2 - 1)$$
(5.72)

hat. Aus der Bedingung  $u_0 \leq u < 1$  und der Forderung nach reellen Lösungen von (5.70)  $(f(u) \geq 0 \stackrel{(5.71)}{\longleftrightarrow} f''(u_0) \geq 0)$  folgt

$$c \geqq 1 \stackrel{(5.65)}{\Longleftrightarrow} v_{\parallel} \geqq c_s \tag{5.73}$$

Was gerade das Chodura-Kriterium (5.56) an der magnetischen Vorschichtkante ist.

### 5.3.1 Die magnetische Vorschicht

Wie im letzten Abschnitt erläutert wurde, kommt neben dem ursprünglichen Bohm-Kriterium die zusätzliche Chodura-Bedingung (5.56) hinzu. Das elektrische Feld senkrecht zur Wand, welches notwendig ist, um den Ionenfluss neu zu justieren, muss sich demnach in einem additiven, zum Vergleichsfall  $\alpha = 0^{\circ}$ , Potentialgradienten vor der Schichtkante sichtbar machen lassen. Um dies zu untersuchen, wurde das B-Feld, wie in Skizze (5.27) angedeutet, in der *xy*-Ebene um den Winkel  $\alpha$  gegen die Oberflächennormale gedreht. Die so entstehenden Simulationsergebnisse, sind Abbildung (5.29) zu entnehmen.

Es zeigt sich, wie erwartet, der zusätzliche Potentialabfall in der magnetischen Vorschicht, welcher mit zunehmendem Winkel stärker wird [23]. Stangeby [3] und Chodura [23] schätzen beide



**Abbildung 5.29:** Potentialverläufe bei um verschiedene  $\alpha$  gegen die Oberflächennormale gedrehtem B-Feld (Szenario I)

die Ausdehnung der magnetischen Vorschicht auf die Größenordnung des Ionengyrationsradius  $\rho_g$  ab. Für nicht senkrechten Einfall und um das Bohm-Kriterium wissend, lässt sich dieser, wie schon in (5.62), in der Umgebung der Schichtkante wieder wie folgt annehmen

$$\rho_g := \frac{c_s}{\frac{eB}{m_i}} \tag{5.74}$$

Da für die Untersuchung der magnetischen Vorschicht diese Größe die entscheidendere Skalierung darstellt, wurde für die Abbildungen (5.29), (5.30) sowie (5.31) eine zusätzliche Skalierung für die *x*-Achse oben eingeführt.

Einer Analyse erster Ordnung folgend schätzt Stangeby ab, dass der gesamte Potentialabfall in magnetischer Vorschicht und Debye-Schicht unabhängig vom Winkel  $\alpha$  ist. Um dies zu untersuchen, werden die Potentialverläufe aus Abbildung (5.29) nochmals in (5.30) gezeigt.

Diesmal wird jedoch nur der Teil vor der Wand, also nur die magnetische Vorschicht und die Debye-Schicht gezeigt. Zwar ist der Startpunkt der magnetischen Vorschicht schwer auszumachen, doch der Analyse zu Graph (5.31) folgend liegt dieser bei etwa  $x_2 \approx 20\rho_g$ . An dieser Stelle werden die Potentiale aus (5.29) durch eine neue Integrationskonstante auf 0 gesetzt. Damit hat man die Möglichkeit, die Summe des Potentialabfalls in der magnetischen Vorschicht  $\phi_m$  und der Schicht  $\phi_s$  zu untersuchen. Man sieht nun an Abbildung (5.30), dass wie erwartet keine starke Abhängigkeit zwischen  $\alpha$  und besagter Summe besteht (vgl. auch Abb. (3) a in [23]). Insgesamt fällt das Potential immer um etwa  $|e\Delta\phi|/T_e \approx 3$  ab. Dies entspricht nahezu exakt dem für diesen Abfall abgeschätzten Wert (vgl. [70] Abschnitt III). Der zusätzliche Potentialabfall in der magnetischen Vorschicht  $\phi_m$  geht also in erster Ordnung zu Lasten des Abfalls in der Schicht  $\phi_s$  selber.



**Abbildung 5.30:** Magnetische Vorschicht und Schicht bei um verschiedene  $\alpha$  gegen die Oberflächennormale gedrehten B-Feld (Szenario I)

$$\phi_m + \phi_s \approx \frac{|e\Delta\phi|}{T_e} \approx 3; \forall \alpha$$
 (5.75)

Um nun die Ursachen dieses zusätzlichen Potentialabfalls zu beleuchten, werden zunächst die Geschwindigkeitskomponenten der Ionen auf ein 1d Gitter in x-Richtung projiziert und dort in den einzelnen Zellen gemittelt. Das Ergebnis dieser Vorgehensweise, ist Abbildung (5.31) zu entnehmen.

Man sieht, dass ganz links, im Einschussbereich der Teilchen, zunächst wieder turbulentes Verhalten, bedingt durch die Randbedingungen, entsteht. Nach diesem Einschwingbereich beschleunigen die Ionen parallel zur Feldrichtung, um dann bei  $x_1 := 12 \rho_g$  im Mittel Schallgeschwindigkeit zu erreichen. Der für die magnetische Vorschicht entscheidende Teil geschieht jedoch im Bereich zwischen  $x_2 := 21 \rho_g$  bis  $x_3 := 24 \rho_g$ . Als erstes bemerkt man, dass bei  $x_3$  die zur Wand senkrechte Komponente  $\langle v_x \rangle \approx c_s$  ist. Nach dem Bohm-Kriterium (5.57) muss hier also die Schichtkante liegen. Im benannten Bereich vor der Schichtkante beobachtet man nun, dass die *y*-Komponente der Ionengeschwindigkeiten im Mittel stagniert, während die *x*-Komponente schnell anwächst. Dies bedeutet wie in (5.32) skizziert, dass sich in diesem Bereich der Ionenfluss senkrecht auf die Wand ausrichtet.

Der Diskussion im letzten Abschnitt folgend muss also der Abschnitt von  $x_2$  bis  $x_3$  in die magnetische Vorschicht fallen. Da aber  $\langle v_y \rangle$  konstant bleibt, während  $\langle v_x \rangle$  zunimmt, ist darauf zu schließen, dass es nicht zu einer Drehung, wie etwa in [3] beschrieben, sondern zu einer zusätzlichen Beschleunigung senkrecht zur Wand kommt (vgl. Skizze (5.32)). Erst in der Schicht nimmt dann die *y*-Komponente ab.

Eine weitere Auffälligkeit aus (5.31) zeigt sich in der  $\langle v_z \rangle$ -Komponente. Diese ist im Bereich von  $x_1$  bis  $x_2$  näherungsweise konstant positiv und wächst dann ab  $\sim 22 \rho_g$  an. Vergleicht man



Abbildung 5.31: Mittlere Geschwindigkeitskomponenten der Ionen bei  $\alpha = 45^{\circ}$ 



**Abbildung 5.32:** Skizze der Geschwindikeitskomponenten an zwei Stellen  $x_a$  und  $x_b$  in der xy-Ebene  $(x_2 \leq x_a < x_b \leq x_3)$ 

diese Ortsangaben mit dem Potentialverlauf (Abb. (5.29);  $\alpha = 45^{\circ}$ ), so sieht man, dass im ersten Bereich der Potentialgradient in x-Richtung konstant ist und dann ab 22  $\rho_g$  zunimmt. Das heißt, man hat es mit einem zunächst konstanten Feld  $E_x$  zu tun, welches dann bei Annäherung an die Schicht anwächst. Damit lässt sich vermuten, dass die mittlere Geschwindigkeit in z-Richtung ein  $\vec{E} \times \vec{B}$ -Drift ist, welcher einer der beschriebenen Vorschichtmechanismen (siehe Abschnitt 4.1.3) ist.

Um diese Vermutung quantitativ zu untersuchen, wird die Ionengeschwindigkeitsverteilung im Bereich 3 (5.4) in *z*-Richtung untersucht.

Man sieht nun im Histogramm (5.33) deutlich eine mittlere Ionengeschwindigkeit in positive z-Richtung. Aus den Daten lässt sich diese zu

$$\langle v_z \rangle \approx 2 \cdot 10^4 \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \approx 0,16 \, c_s$$
 (5.76)

bestimmen. In Bereich 3 ist ein mittleres Feld in x-Richtung in der Größenordnung



Abbildung 5.33:  $\vec{E} \times \vec{B}$ -Drift in z-Richtung für  $\alpha = 45^{\circ}$ 

$$\langle E_x \rangle \propto 10^4 \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{m}}$$
 (5.77)

auszumachen. Damit wäre ein entsprechender Drift in der Ordnung

$$|\vec{v}| = \frac{|\vec{E} \times \vec{B}|}{B^2} \propto 10^4 \tag{5.78}$$

zu erwarten, was sich mit den Simulationsergebnissen (5.76) deckt. Im Kontext mit dem  $\vec{E} \times \vec{B}$ -Drift fällt beim Studium von Abbildung (5.31) auch auf, dass  $\langle v_z \rangle$ im Bereich der magnetischen Vorschichtkante nicht flach verläuft. Das heißt es gilt

$$\frac{\partial \langle v_z \rangle}{\partial x} \neq 0 \tag{5.79}$$

nach der ausführlichen Diskussion von Stangeby [70], ermöglicht dies erst Lösungen mit  $\langle v_{\parallel B} \rangle > c_s$  an der magnetischen Vorschichtkante. Was der hier erzielten (beachte blaue Kurve für  $\langle v_{\parallel B} \rangle$  in Abb. (5.31)) entspricht.

# 5.4 Vergleiche mit vorherigen Arbeiten

Bevor damit fortgefahren wird, die numerischen Rahmenbedingungen für etwaige Divertorsimulationen abzustecken, soll hier nochmals übersichtlich ein Vergleich von Resultaten mit
bisherigen, gleichgearteten Modellen dargestellt werden. Dabei werden hauptsächlich semianalytische Arbeiten zur Wertung herangezogen. Die eigentliche Gegenüberstellungen erfolgt analog zu Tabelle 1.2 in Stangeby [3].

Werte aus den eigenen Szenarios werden gemäß den in den vorangehenden Abschnitten ausführlich dargestellten Methoden extrahiert. Dabei ist nur zu erwähnen, dass die *Dichte in der Quellregion*  $n_0$  für die Szenarios mit dem Tree-Code an der Stelle  $x = 20\lambda_D$  entnommen wurden. Damit wird vermieden, dass die nun vielfach beschriebene Turbulenz an der Quelle (vgl. Abb. (4.20)) Einfluss auf das Ergebnis hat.

### 5.4.1 Stoßfreie Systeme

Größe	1	2	3	4	5	6
Potentialabfall in der Schicht $e\Delta\phi/T_e$	2,71	2,56	2,56	2,41	2,3	2,3
Flussgeschwindigkeit an der Schichtkante $\langle v \rangle / c_s$	1,14	0,93	-	1,22	1, 17	1, 12
Dichte an der Schichtkante $n_{se}/n_0$	0, 43	0,67	-	0,67	0, 68	0, 66

**Tabelle 5.2:** Schichtrelevante Vergleichswerte stoßfreier Systeme analog zu Tabelle 1.2 in Stangeby [3]. Modelle/Spalten 1-6 nummeriert gemäß unterer Aufzählung. Rote Werte kennzeichnen Ergebnisse eigener Simulationen

- 1 Tonks und Langmuir [81]. Werte aus Stangeby [3] Tabelle 10.1. (S. 412)
- 2 Emmert et. al. [2]. Eigene, numerische Auswertungen.
- **3** Stoßfreier Fall nach Scheuer und Emmert ( $\delta = 1000$  in Tabelle 1 aus [24]).
- 4 Szenario I.
- **5** Szenario II a.
- 6 Szenario II b.

An den hier zusammengetragenen Resultaten zeigt sich, dass das neue Wandmodell des Tree-Codes sich nahezu nahtlos in bisher existente semianalytische Modelle einfügt. Die Schwankungen zwischen den einzelnen Modellen lassen keinen Schluss auf systematische Fehler zu. Es fällt auch auf, dass der Tree-Code den Dichteabfall (letzte Zeile in Tabelle (5.2)) konform zur Emmert-Theorie reproduziert. Dies ist erwähnenswert, da die Arbeiten [2] und [24] Plasma-Schicht-Gleichungen eigentlich auf einer gröberen Skala, der Vorschichtskala, lösen. Der Tree-Code hingegen arbeitet hier durchweg mit einer Auflösung in Größenordnungen der Debye-Länge. Außerdem scheint die Flussgeschwindigkeit bei den Tree-Code Ergebnissen näher an dem Modell von Tonks und Langmuir. Dies ist interessant, da der Code damit, anders als Emmert et. al, das originale Bohm-Kriterium (4.19) erfüllt.

Prinzipiell ist zu resümieren, dass die hier ausgeführten Simulationen bestätigen, dass die Flüssigkeitsnäherung (siehe auch Spalte 7 in Tabelle (5.3)) selbst für den nahezu stoßfreien Schichtbereich meist eine gute Näherung darstellt.

### 5.4.2 Stößige Systeme

Für stößige Systeme, zeigt sich, dass adäquate Vergleichswerte wesentlich schwerer zugänglich sind. Dies macht auf der einen Seite eine Einordnung der erzielten Resultate schwerer. Auf der anderen Seite zeigt es jedoch auch, wo die neu geschaffenen Möglichkeiten mit dem Tree-Code und den zusätzlich entwickelten Modulen neue Einsichten in die Schichtphysik versprechen. Nichtsdestotrotz sind hier auch wieder Werte analog zu Tabelle (5.2) beziehungsweise Tabelle 1.2 in Stangeby [3] zusammengetragen.

Größe	7	8	9	10	11
Stößigkeit $\nu *^{-1} = \langle l \rangle / l_x$	-	1, 17	1,05	1, 43	5,20
Potentialabfall in der Schicht $e\Delta\phi/T_e$	2,49	2,57	2,48	2,59	2,35
Flussgeschwindigkeit an der Schichtkante $\langle v \rangle / c_s$	1,00	-	-	1, 30	0,91
Dichte an der Schichtkante $n_{se}/n_0$	0, 50	-	-	0, 50	0, 22

**Tabelle 5.3:** Schichtrelevante Vergleichswerte stößiger Systeme analog zu Tabelle 1.2 in Stangeby [3]. Modelle/Spalten 7-11 nummeriert gemäß unterer Aufzählung. Rote Werte kennzeichnen Ergebnisse eigener Simulationen

- 7 Isotherme Flüssigkeitsnäherung (Werte aus Stangeby [3] Tabelle 1.2, Spalte 1).
- 8 Stößiger Fall (Ionen-Ionen) nach Scheuer und Emmert mit Teilchen-, Impuls- und Energieerhaltung ( $\nu *^{-1} \cong \delta = 1, 17$ ; Fall 3 in Tabelle 1 aus [24]).
- 9 Stößiger Fall (Ionen-Neutronen) nach Scheuer und Emmert mit Teilchenerhaltung ( $\nu *^{-1}$  $=\delta = 1,05$ ; Fall 1 in Tabelle 1 aus [24]).
- **10** Szenario III.
- 11 Szenario II a mit Neutralgashintergrund (Hintergrunddichte:  $n_b = 10^{21} \text{ m}^{-3}$ ) gemäß Abschnitt 5.2.4.

Als erstes bietet es sich an, Spalte 10 (Szenario III) mit Spalte 8 und 7 zu vergleichen. Man sieht zunächst, dass die Potentialabfälle in der Schicht nahezu identisch sind. Dies bestätigt, dass die Schicht selber kaum von der Stößigkeit im Plasma-/ Vorschichtbereich beeinflusst wird. Auch die Neutralgasreibung ändert daran nicht viel (siehe Spalte 9 und 11 sowie die Diskussion in Abschnitt IV A in [24] ).

Weiterhin zeigt der Vergleich von Spalte 10 und 7, dass Szenario III nur geringe Abweichungen zur Flüssigkeitsnäherung aufweist. Dies ist bemerkenswert, da die Ionengeschwindigkeitsverteilungen (siehe Abb. (5.21)) nicht mit Maxwell-Verteilungen identifiziert werden konnten. Auffällig ist auch die dramatische Abnahme der Plasmadichte im Falle von Neutralgasreibung (Spalte 11). Ein Effekt, der mit Sicherheit auch zu Phänomenen wie das Loslösen des Plasmas von Divertorplatten (*Detachment*) beiträgt.

## Kapitel 6

## Vorbereitungen auf Divertorsimulationen

Ein Hauptgrund für die durchgeführten und in den letzten beiden Kapiteln zusammengetragenen Rechnungen, ist die Eröffnung neuer Simulationsmethoden für die Plasmarandwechselwirkung. So ist ein angestrebtes Ziel, die hier vorgestellten neuen Konzepte etwa für Berechnungen im Divertorbereich von TOKAMAKs zu nutzen. Die zunächst eingesetzten, physikalischen Parameter sind für diesen Zweck noch nicht stimmig, doch sind ihre Werte so gewählt, dass gewisse Abschätzungen über benötigte Ressourcen und Größen detailliert besprochen und eingegrenzt werden können. Dafür soll das vorliegende Kapitel genutzt werden.

### 6.1 $\epsilon$ -Studie

Wie im ersten Kapitel beschrieben, ist eine der a priori Konstanten von PEPC-B die Plummer-Konstante  $\epsilon$  aus Gleichung (2.10). Als Richtlinie für ihre Wahl gilt

$$\epsilon \lessapprox \overline{l}$$
 (6.1)

Mit dem mittleren Teilchenabstand  $\overline{l}$ . Dieser ergibt sich für die hier vorgestellten Szenarios zu

$$\bar{l} := \left(\frac{V_{sim}}{N_s}\right)^{1/3} \approx 10^{-5} \text{ m}; s = i, e$$
(6.2)

Ad hoc ist jedoch schwer zu sagen, um welche Größenordnung  $\epsilon$  kleiner als l sein muss. Ein zu kleiner Wert wird die Dynamik der Teilchen verändern, sollte aber von verschwindendem Einfluss auf die Elektrostatik sein. Genaue Untersuchungen zeigen, dass ein zu gering angesetztes  $\epsilon$  eine numerische Heizung für die Elektronen generiert. Wie in [29] ist dieser numerische Effekt auf ein Zusammenspiel zwischen einem 1/r-Potential und der numerischen Integration mit endlicher Zeitschrittweite zurückzuführen. Letztere führt dazu, dass sich geladene Teilchen unphysikalisch nahe kommen und dann im nächsten Zeitschritt zu energetisch voneinander abprallen. Man sieht dies zum Einen an der Zunahme des Effekts für abnehmende Plummer-Konstante  $\epsilon$ 

(vgl. Tabelle (6.1)) zum Anderen an der Tatsache, dass der Effekt bei den trägeren Ionen nahezu nicht bemerkbar ist (vgl. Abschnitt 5.2, Abb. (5.6))



$\epsilon \ /m$	$\mathbf{T}_{\mathbf{e}}^{(\mathbf{se})} \; / e V$	$rac{ \mathbf{T}_{\mathbf{e}}^{(\mathbf{se})}-\mathbf{T}_{\mathbf{e}} }{\mathbf{T}_{\mathbf{e}}} \ /\%$
$10^{-4}$	78, 14	2, 3
$10^{-5}$	78, 2	2,3
$10^{-6}$	86, 6	8
$10^{-7}$	102	28
$10^{-8}$	101, 24	26, 3

Tabelle 6.1:  $\epsilon$ -Studie (Szenario I)

Abbildung 6.1: Elektronengeschwindigkeitsverteilung an der Schichtkante für  $\epsilon = 10^{-5}$  m und numerischer Fit (Szenario I)

Zum Zweck einer genaueren Untersuchung wird, wie in Abbildung (6.1) gezeigt, für verschiedene Werte von  $\epsilon$  die Temperatur der Elektronen mittels eines numerischen Gauß-Fits im Bereich 3 (5.4) und der Formel (5.2) die Elektronentemperatur  $T_e^{(se)}$  direkt ermittelt. Die korrespondierenden Ergebnisse sind in Tabelle (6.1) zusammengetragen. Es ist deutlich zu sehen, dass die Elektronentemperatur für  $\epsilon \leq 10^{-7}$  m die Fehlergrenze, vorgegeben durch das Teilchenrauschen (4.69), überschreitet.

Normiert man jedoch die Potentialverläufe nicht mehr wie bisher mit der Quellentemperatur  $T_e$ , sondern mit der wahren Elektronentemperatur  $T_e^{(se)}$ , so zeigt Figur (6.2), dass das Potential für abnehmendes  $\epsilon$  konvergiert.

Man sieht weiterhin, dass sich der Verlauf des Potentials für  $\epsilon \leq 10^{-6}$  m nicht weiter ändert. Der Schluss aus den hier gezeigten zwei Betrachtungen ist, dass

$$\epsilon \approx 10^{-1} \cdot \bar{l} \tag{6.3}$$

die logische Wahl scheint. Mit diesem Wert hat man ein stabiles Potential (6.2) und noch keine signifikante numerische Elektronenheizung (Tabelle (6.1)) gleichzeitig ist (6.1) gewährleistet.

### 6.2 Einfluss der Teilchenauflösung

Einen wichtigen Einfluss auf die Verlässlichkeit der Simulationsergebnisse hat die Auflösung der Debye-Abschirmung  $\mathcal{A}$  (4.56) durch Simulationsteilchen. Das heißt, trotz der Möglichkeit, die einzelnen Simulationsteilchen mit einem Superteilchenfaktor (3.5) hochzuskalieren, müssen im Mittel ausreichend viele Simulationsteilchen  $N_s$  vorhanden sein, um räumliche Effekte aufzulösen. Die Anzahl, wie viele Teilchen tatsächlich benötigt werden, ist dabei a priori schwer abzuschätzen. Etwa sprechen Takizuka et. al [21] in einer Dimension von einer benötigten



Abbildung 6.2: Potentialverläufe für verschiedene Werte von  $\epsilon$  normiert mit  $T_e^{(se)}$  aus Tabelle (6.1) (Szenario I)

Auflösung  $A_{1d} \sim 10 - 100 \ 1/\lambda_D$ , um "verlässliche" Ergebnisse zu erzielen. Generell ist eine gesicherte Aussage, über tatsächliche Größenordnungen von A in der Literatur schon für 1d Simulationen nicht klar auszumachen. Dies drückt sich unter anderem in diesbezüglich stark unterschiedlichen Werten bei bisherigen Simulationen aus (vgl. Werte für  $N_{pD}$  in Tabelle 1 aus [57]). Da aber gerade diese Zahl von entscheidendem Einfluss für zukünftige Divertorszenarios 6.3 ist, muss sie eingehend untersucht werden. Deshalb wird hier erstmalig ein neues Testkonzept vorgeschlagen, um benötigte Auflösungen in Teilchensimulationen fundiert festzulegen. Zunächst steckt man den in Frage kommenden Bereich  $N_s$  mittels einer Potentialuntersuchung ab.

Dazu zeigt Figur (6.3), wie sich der ermittelte Potentialverlauf mit unterschiedlichen Zahlen für  $N_i = N_e$  und damit variierender Auflösung  $\mathcal{A}$  verändert. Es ist sofort ersichtlich, dass Auflösungen  $\mathcal{A} \leq 100 \ 1/\lambda_D^3$  zu gering sind. In diesen Fällen ist der Potentialabfall in der Schicht mitunter um Größenordnungen tiefer als die Theorie (etwa Emmert et. al [2]) dies prognostiziert. Zudem ist die Ausdehnung der Schicht teilweise größer als  $10\lambda_D$ . Dieser Umstand spricht dafür, dass die Debye-Abschirmung und damit die sich in der gleichen Größenordnung ausbildende Schicht nicht ausreichend aufgelöst wird. Erst ab  $\mathcal{A} \approx 200 \ 1/\lambda_D^3$  ist das Potential im Rahmen des erwarteten Rauschens an den Referenzfall  $\mathcal{A} \approx 500 \ 1/\lambda_D^3$  konvergiert. Damit steht der Bereich, welcher einer weiteren, zweiten Prüfung unterzogen wird fest.

Um nun weiter über die benötigte Auflösung urteilen zu können, überlegt man sich, dass zukünftige Simulationen eine verlässliche Aussage für kinetische Vorhersagen ermöglichen müssen. Das heißt, es müssen aussagekräftige Geschwindigkeitsstatistiken für Ionen im Bereich der Schichtkante produziert werden können. Es muss demnach getestet werden, ob die eingesetzte Simulationsteilchenzahl  $N_i = N_e$  ausreicht, um solche Statistiken zu liefern. Dementsprechend ist der nächste Test ausgelegt.



Abbildung 6.3: Potentialverläufe bei unterschiedlichen Teilchenauflösungen  $\mathcal{A}$  (4.56) (Szenario I)

Die Idee ist es, eine als gesichert angenommene, kinetische Gegebenheit zu untersuchen und festzustellen, ob die erzielte Ionenauflösung ausreicht, um auf diese sicher zu schließen. Als eine solche Gegebenheit wird hier die Geschwindigkeitsverteilung der Ionen im Bereich 3 (5.4) in z-Richtung gewählt. Wie schon frühere Studien 5.2 zeigen, ist besagte Verteilung in der yund der gleichberechtigten z-Richtung als sicher Gauß-verteilt mit  $T_i \approx 80$  eV anzunehmen. Das heißt, man kann Wahrscheinlichkeitsdichten der Form

$$f_a(v_z^i) := \frac{1}{2\pi \sigma^2} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{\sigma^2} (v_z^i)^2\right\}$$
(6.4)

an entsprechende, normierte Histogramme bei verschiedener Auflösung fitten. Mit der Varianz  $\sigma^2$  als einzige Fitkonstante kann man nicht nur die Ionentemperatur durch Gleichung (5.2) ermitteln, sondern auch beurteilen, ob die gegebene Statistik ausreicht, um auf die Gauß-Verteilung zu schließen. Dies geschieht mittels eines *Pearson Chi-Quadrat Test* [88, 89, 90, 91]. Man stellt also die *Null-Hypothese*  $H_0$  einer Gauß-verteilten Statistik auf

$$H_0: v_z^i$$
 ist Gauß-verteilt (6.5)

und prüft für verschiedene Auflösungen das *Signifikanzniveau* dieser Hypothese. Dazu wird die Prüfgröße (6.6)

$$V(r)^{2} := \sum_{j=1}^{r} \frac{(x_{j} - n\pi_{j})^{2}}{n\pi_{j}} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{r} \frac{x_{j}^{2}}{\pi_{j}} - n$$
(6.6)

mit den tabellierten  $(1-\alpha)$ -Quantilen der  $\chi^2_{r-1}$ -Verteilung für verschiedene Signifikanzniveaus

 $(1 - \alpha)$ ;  $\alpha = 0, 1; 0, 05; 0, 01$  verglichen. Für den hier ausgeführten Test sind die in (6.6) auftretenden Größen der Reihe nach

- r : # der Balken des Histogramms
- n : Stichprobengröße (# der Teilchen im gesamten Histogramm)

$$x_j$$
 : # Teilchen im *j*-ten Balken  $\left( \rightarrow \sum_{j=1}^r x_j = n \right)$ 

 $\pi_i$ : Theoretische Wahrscheinlichkeit für Balken j (6.7)

Letztere ergeben sich mit der Fitfunktion (6.4) aus

$$\pi_j := \int_{v_{start}+j \cdot \Delta_{v_z^i}}^{v_{start}+(j+1) \cdot \Delta_{v_z^i}} f_a(v_z^i) \, dv_z^i \tag{6.8}$$

Dabei ist

$$\Delta_{v_z^i} := \frac{v_{end} - v_{start}}{r} \tag{6.9}$$

die Ausgangsbalkenbreite. Für einen aussagekräftigen Test müssen  $v_{start}$  und  $v_{end}$  zunächst so gewählt werden, dass

$$\sum_{j=1}^{r} \pi_j \approx 1 \tag{6.10}$$

ist. Es zeigt sich, dass diesbezüglich  $v_{start} = -3, 3 \cdot 10^{5}$  m/s und  $v_{end} = 3, 3 \cdot 10^{5}$  m/s eine gute Wahl sind. Das jeweils zu untersuchende Histogramm hat r = 50 Balken. Damit gilt für alle untersuchten Auflösungsfälle die Qualitätsbedingung (6.11) [88]

$$n\pi_j \ge 1 \; ; \forall j = 1, \dots, r \tag{6.11}$$

Zusätzlich muss darauf geachtet werden, dass mindestens  $r_s \ge 80\%$  der r Balken einen theore-

tischen Teilcheninhalt von  $n\pi_j \ge 5$ ;  $\forall j = 1, ..., r$  haben (vgl. Tabelle (6.2)). Die somit ermittelte Prüfgröße  $V(r)^2$  (6.6) wird mit der  $\chi^2_{(1-\alpha),(50-1-1)}$ -Verteilung für verschiedene Signifikanzniveaus verglichen. Die entsprechenden Ergebnisse sind nun detailliert in der Tabelle (6.2) zusammengetragen.

Zunächst wird deutlich, dass die Stichprobengröße n erwartungsgemäß näherungsweise mit dem gleichen Faktor wie A zurückgeht. Die mit zunehmender Auflösung abnehmenden Werte von  $V(r)^2$  sprechen deutlich für eine Zunahme der Güte des Fits für größere Stichproben.

$\mathcal{A}/(1/\lambda_D^3)$	n	$r_s$	$V(r)^2$	$\chi^2_{(1-0,6),(48)}$	$\chi^2_{(1-0,4),(48)}$	$\chi^2_{(1-0,2),(48)}$	$\chi^2_{(1-0,055),(48)}$
500	39218	50 <i>=</i> 100%	46, 49	44, 92	49,84	55,99	64,61
300	23336	$48 \widehat{=} 96\%$	50, 61	44,92	49,84	55,99	64,61
200	15373	48 <b>≘</b> 96%	58, 50	44,92	49,94	55,99	64,61
100	7413	43 = 86%	65, 27	44,92	49,84	55,99	<b>64</b> , <b>61</b>

*Tabelle 6.2:*  $\chi^2$ -Anpassungstests mit roten, kritischen Quantilen

Anders als sonst für  $\chi^2$ -Tests üblich, wird nicht für feste Signifikanzniveaus  $\alpha$  geprüft, ob  $H_0$  verworfen werden kann, sondern nach dem kritischen Quantil gesucht, mit dem man verwirft. Die in der Tabelle rot gekennzeichneten Werte  $\chi^2_{(1-\alpha),(48)}$  sind dementsprechend die Werte mit

$$V(r)^2 \gtrsim \chi^2_{(1-\alpha),(48)}$$
 (6.12)

Man sieht nun, dass für Auflösungen  $\mathcal{A} \geq 200 \ 1/\lambda_D^3$  die Werte, von  $\alpha$  bei denen  $H_0$  verworfen wird, sehr hoch sind ( $\alpha \geq 20\%$ ). Das heißt, ein Fehler erster Ordnung, also das Ablehnen einer richtigen Null-Hypothese  $H_0$ , wäre an eine hohe Irrtumswahrscheinlichkeit  $\alpha$  gekoppelt. Jedoch zeigt die Auflösung von  $\mathcal{A} = 100 \ 1/\lambda_D^3$ , dass ein Ablehnen der Hypothese nur einen Irrtum in 5, 5% der Fälle berücksichtigt. Das bedeutet, dass wenn man davon ausgeht, dass die Ionen in z-Richtung gemäß der Quelle tatsächlich Gauß-verteilt sind, man hier bei einer Ablehnung einen Fehler erster Ordnung begehen würde.

Daraus schließt man, dass ein ausreichendes Auflösungsvermögen für kinetische Prognosen im untersuchten Modell eine Teilchenauflösung von mindestens

$$\mathcal{A} \stackrel{!}{\geq} 150 \, {}^{1}\!/\!\lambda_{D}^{3} \tag{6.13}$$

pro Teilchensorte s = i, e voraussetzt, um sowohl das Potential voll aufzulösen (6.3) als auch etwaige Wahrscheinlichkeitsdichten aussagekräftig verwerfen zu können.

### 6.3 Parameter für ITER-Studie

Mit dem im vorherigen Abschnitt komplettierten Auflösungstest sind nun alle Bausteine zusammen, um eine gesicherte Aussage über benötigte Ressourcen für ITER relevante Tests zu prognostizieren. Startpunkt dieser Betrachtungen sei Gleichung (4.56) für die Teilchenauflösung

$$\mathcal{A} = \frac{N_s}{\frac{V_{sim}}{\lambda_D^3}} = \frac{N_s}{\frac{l_y \cdot l_z \cdot l_x}{\lambda_D^3}}; s = i, e$$
  
$$\Leftrightarrow N_s = \mathcal{A} \frac{l_y \cdot l_z \cdot l_x}{\lambda_D^3}; s = i, e$$
(6.14)

Für die gleichberechtigten Richtungen y und z bemüht man die in 4.2 bereits erwähnte Bedingung ( $\rho_q$ : Ionengyrationsradius)

$$l_{y,z} \approx 2\rho_g \approx 2\frac{v_\perp}{\omega_c} := 2\frac{\sqrt{\frac{T_i}{m_i}}}{\frac{q_i B}{m_i}}$$
(6.15)

Weiterhin zeigt sich, dass für ein ITER-relevantes Szenario ( $n_e \sim 10^{20} \text{ m}^{-3}$ ,  $B \sim 6 \text{ T}$ ,  $T_i = T_e \sim 5 \text{ eV}$ ) eine Systemlänge von

$$l_x \approx 1300\lambda_D \tag{6.16}$$

veranschlagt werden muss, um eine Stößigkeitsprüfgröße (5.34) von  $\nu^* \approx 1$  zu erhalten. Durch Einsetzen von (6.16) und (6.15) in (6.14) erhält man für die Anzahl an benötigten Simulationsteilchen

$$N_{s} = \mathcal{A} \cdot 4 \frac{\frac{T_{i} m_{i}^{2}}{m_{i} q_{i}^{2} B^{2}} \cdot 1300\lambda_{D}}{\lambda_{D}^{3}} = \mathcal{A} \cdot 4 \frac{\frac{T_{i} m_{i}}{q_{i}^{2} B^{2}} \cdot 1300}{\lambda_{D}^{2}}; s = i, e$$

$$\stackrel{(4.2)}{=} \mathcal{A} \cdot 4 \frac{1300 T_{i} m_{i}}{q_{i}^{2} B^{2}} \cdot \frac{n_{e} e^{2}}{\varepsilon_{0} T_{e}}; s = i, e$$

$$= \frac{5200 T_{i} m_{i}}{q_{i}^{2} B^{2}} \cdot \frac{e^{2}}{\varepsilon_{0} T_{e}} \cdot \mathcal{A} n_{e}; s = i, e$$
(6.17)

(6.17) zeigt nun eindeutig, dass  $N_s$  linear mit der zu simulierenden Dichte anwächst. Mit den weiteren Vereinfachungen

$$T_i = T_e \; ; q_i = e \tag{6.18}$$

folgert man weiter

$$N_s = \frac{5200}{B^2} \frac{m_i}{\varepsilon_0} \cdot \mathcal{A} \, n_e \, ; s = i, e$$
(6.19)

Mit den schon zuvor veranschlagten ITER-Parametern ( $n_e \sim 10^{20} \text{ m}^{-3}$ ,  $B \sim 6 \text{ T}$ ) und der in (6.13) geforderten Auflösung gelangt man zu

$$N_s \approx 4, 1 \cdot 10^8 \tag{6.20}$$

Simulationsteilchen pro Sorte s = i, e also insgesamt

$$N = N_i + N_e = N_s \approx 8, 2 \cdot 10^8 \tag{6.21}$$

Teilchen.

Natürlich ändert sich mit der hohen Dichte auch die aufzulösende Plasmafrequenz  $\omega_p$ . Jedoch nimmt die Debye-Länge im gleichen Maße ab, was bedeutet, dass die veranschlagte Systemlänge absolut kleiner wird. Man kann also mit

$$\omega_n \Delta t = 0,58\tag{6.22}$$

die Plasmafrequenz verlässlich (3.44) auflösen und dennoch mit (4.58)

$$K = \frac{2 l_x}{\bar{v} \Delta t} \approx 124000 \tag{6.23}$$

Zeitschritten eine Konvergenz des Systems erreichen, ohne das physikalische Massenverhältnis  $m_i/m_e \approx 1836$  abändern zu müssen.

#### 6.3.1 Diskussion

Was bedeuten nun die im vorangegangenen Abschnitt begründeten Studien für die Machbarkeit einer vollkinetischen Divertorsimulation mittels PEPC-B?

Das wichtigste Merkmal für eine adäquate Antwort darauf ist die benötigte Teilchenzahl (6.21). Sicherlich stellen Teilchenzahlen in der Größenordnung ~  $10^8$  herausfordernde, aber keineswegs utopische Bedingungen dar. Experimentelle Versionen von PEPC laufen schon jetzt mit diesen Größenordnungen stabil [45]. Jedoch ist die dafür benötigte Anzahl an Prozessoren mit  $n_{CPU} \sim 8000$  mit den Kontingenten auf HPC-FF nicht mehr zu bewältigen, da hier die maximal verfügbare Prozessoranzahl bei  $n_{CPU}^{hpc-ff} = 4096$  liegt. Das heißt der hin zu Fusionsanwendungen modifizierte Code, wie er hier vorgestellt wurde, muss zunächst auf JUGENE portiert und dann mit den bereits an anderer Stelle getesteten Neuerungen im Bereich des Höchstleistungsrechnens (*Super-Computings*), wie etwa neue, bessere Sortieralgorithmen ausgestattet werden. Erste Schritte in dieser Richtung wurden schon unternommen. So laufen etwa bereits Simulationen in der Größenordnung wie sie in diesem Kapitel vorgestellt wurden, verlässlich auf JUGENE. Um aber wirkliche Produktionsläufe in dem Bereich (6.21) zu realisieren, muss die angedeutete Arbeit in neuen Projekten durchgeführt und vervollkommnet werden.

# Kapitel 7

## **Zusammenfassung und Ausblick**

Der Ausgangspunkt dieser Arbeit ist der massiv parallele Tree-Code PEPC-B, wie er in der Simulation von Laser-Plasma-Wechselwirkungen zum Einsatz kommt [?]. Schwerpunkt der dieser Arbeit zugrunde liegenden Fragestellung war es, die gitterfreie Doktrin, auf der PEPC-B basiert, hin zu einem Simulationswerkzeug für die Fusionsforschung, speziell der Plasma-Wand-Wechselwirkung, weiterzuentwickeln. Konkret bedeutet dies, dass es galt, wo nötig, neue Module für PEPC-B zu entwickeln, um dann die Stärken von Tree-Codes, wie etwa hohes Auflösungsvermögen und natürliche Behandlung von Coulomb-Stößen, gepaart mit geometrischer Einfachheit in ersten relevanten Simulationsszenarios aufzuzeigen.

Hierfür sind im ersten Kapitel (2.1) zunächst die Grundprinzipien gitterfreier Methoden anhand von zweidimensionalen Beispielen und Herleitungen der Transformationsgleichungen für die entsprechenden Multipole zusammengetragen. Weiter werden die Prinzipien, auf denen die Parallelisierung von PEPC-B fußt, erläutert und der Leser für die Auswirkungen der numerischen Fehler und Eingabeparameter sensibilisiert. Abschließend in diesem Teil wird ein Überblick über den algorithmischen Ablauf des Programms gegeben und im Zuge dessen verdeutlicht, wo die erarbeiteten Neuerungen und Weiterentwicklungen liegen.

Nachdem der nötige Überblick vollständig bereit steht, wird im nächst folgenden Abschnitt 3 ein inhärent wichtiger Teil vollkinetischer Simulationen, der numerische Integrator, behandelt. Dazu wird das sogenannte Leap-Frog-Boris-Schema, welches in PEPC-B diese Aufgabe erfüllt, detailliert vorgestellt. Es werden Formeln erarbeitet, die es möglich machen, die Grenzen dieser Methode bei zu großer Zeitschrittweite abzuschätzen. Um diese Beschränkungen zu umgehen, wird ein neuer Führungszentrumsintegrator entwickelt und mathematisch begründet. Mit eingebundene, numerische Tests belegen, dass das Verfahren eine stark gesteigerte Unempfindlichkeit gegenüber größeren Zeitschrittweiten aufweist. Die prinzipielle Möglichkeit das Verfahren auch in anderen Codes zum Einsatz zu bringen wird in einer abschließenden Diskussion bewertet.

Den letzten großen Themenpunkt dieser Arbeit bilden drei Anwendungskapitel (4). In ihnen fließen alle der zuvor erzielten Ergebnisse zusammen. So kommt an dieser Stelle beispielsweise der neue Führungszentrumsintegrator erfolgreich zur Anwendung. Physikalisch behandelt wird die Schichtbildung von Plasmen in Kontakt mit festen Begrenzungen. Nachdem zuerst auf die Schwierigkeit der Simulation von Randbedingungen mittels gitterfreier Methoden hingewiesen worden ist, wird ein neuartiges Konzept vorgestellt, mit dem diese Lücken geschlossen werden können. Das damit begründete Wandteilchen-Prinzip passt dementsprechend natürlich in das gitterfreie Credo der Codeklasse. Zur Validierung der Methode wird ein quasi eindimensionales Plasma-Wand-Modell vorgeschlagen und ausführlich untersucht.

Zum Zweck einer zweifelsfreien Bestätigung des neuen Konzepts werden ausführliche Konvergenz- und Konsistenztests ausgearbeitet. Es zeigen sich gute Übereinstimmungen der erzielten, numerischen Resultate mit bestehenden semianalytischen, kinetischen Arbeiten [2, 24].

Nachdem die prinzipielle Gültigkeit des Schemas nachgewiesen wurde, werden anwendungsorientierte Simulationen dezidiert ausgewertet. Zuerst zeigt sich bei einer Bewertung der Elektronenkinetik, dass zum Einen die Annahme thermalisierter Elektronen bestätigt werden kann. Zum Anderen ist die Teilchenauflösung hoch genug, um das Fehlen hochenergetischer Elektronen an der Schichtkante zweifelsfrei aufzulösen. Ein Abgleich mit der Theorie bestätigt somit die Konsistenz des Ergebnisses mit den Experimenten von Rayment und Twiddy [22]. Eine anschließende Auswertung der Ionenkinetik offenbart eine adiabatische Abkühlung der Ionen über das Simulationsgebiet hinweg. Weiter ist es möglich, eine Klasse von Funktionen zu definieren, welche die Ionengeschwindigkeitsverteilung am Übergang zwischen Plasma und Schicht beschreibt. Diese neue Funktionenfamilie wird dann in einer ausführlichen Diskussion den Ergebnissen von Emmert et. al [2] gegenüber gestellt.

Die Aussagen werden dann um ein Szenario mit nachweisbar Coulomb-stößiger Vorschicht erweitert. Die so generierten Resultate, welche durch den Tree-Code als stößig nach Fokker und Planck einordbar sind, werden dann exemplarisch mit denen von Scheuer et. al [24] abgeglichen. Damit schließt sich eine Schwäche bisheriger Simulationstechniken in diesem Bereich die auf stärker vereinfachte Viskositätsmodelle (BGK-Operatoren) zurückgreifen mussten. Der Tree-Code bestätigt damit durch einen neuen Ansatz, dass die Coulomb-stoßdominierte Vorschicht nur von geringem Einfluss auf die Schichtphysik selber ist. Besonders stark wird das wiederum durch einen numerischen Fit an die Ionenverteilung und die einhergehende Auswertung klar.

Weiterhin ermöglicht ein neu entwickeltes Konzept für Hintergrundreibung die Berücksichtigung der Interaktion mit einem neutralen Gashintergrund. Dies wird exemplarisch durch das ausarbeiten eines Stoßoperators, welcher Ladungsaustauschstöße in der Vorschicht berücksichtigt, demonstriert. Erste Ergebnisse zeigen, dass der Potentialabfall in der Schicht auch davon weitestgehend unbeeinflusst bleibt. Die Vorschicht zeigt jedoch eine deutlich erhöhte elektrostatische Kraft auf die Simulationsteilchen. Weiterhin lässt sich ein Abfall der Plasmadichte in der Vorschicht nachweisen, der um einen Faktor bis zu 2 höher ist als bei stoßfreien oder viskosen Szenarios.

Auf mittlere Sicht können Simulationen der aufgezeigten Art damit herangezogen werden Teilchen- und Wärmeflüsse auf Divertorplatten oder andere Komponenten in direktem Kontakt mit Fusionsplasmen abzuschätzen. Auch ein erweiterter Einsatz des Neutralgasreibungsmodells könnte Simulationen, welche Effekte, wie etwa das Loslösen des Plasmas von der Wand (*Detachment*) beinhalten, ermöglichen. Dieser Anwendungsbereich könnte ingenieurstechnische Antworten für ITER oder Folgeanlagen deutlich präzisieren und beschleunigen.

Mit diesem Ziel vor Augen, werden im letzten Kapitel die vorgestellten Resultate dazu genutzt, um ein klares Anforderungsprofil für diesbezügliche, zukünftige Simulationen zu erarbeiten. Die detaillierten Abschätzungen zeigen, dass entsprechende Modelle auf modernen Rechenplattformen wie etwa JUGENE mit moderatem Aufwand realisierbar sind.

Generell bleibt als Ergebnis dieser Arbeit festzuhalten, dass sich gitterfreie Methoden im Allgemeinen und PEPC-B im Speziellen als vielseitiges und flexibles Werkzeug für die Simulation der Plasmarandschicht präsentieren. Als Resümee der durchgeführten Simulationen zeigt sich, dass Tree-Codes aufgrund ihrer prinzipiell einfachen Handhabung und ihres direkten Zugriffs auf primäre Plasmaparameter, wie etwa Temperatur und Dichte, im Grunde ein versiertes Labor für ein virtuelles Plasma darstellen.

Um dieses Potential weiter auszubauen, bieten sich mehrere Entwicklungsstränge an.

Sicherlich wäre es möglich, PEPC-B näher an bereits bestehende Simulationswerkzeuge, wie etwa EIRENE, heranzuführen. Dafür müsste die Frage beantwortet werden, wie eine nicht lineare Wechselwirkung von simulierten Ionen mit einem nicht vollkinetisch mitberechneten Plasmahintergrund eingebunden werden kann. Interessante Ansätze hierfür könnte die Theorie der "Dusty Plasmas" liefern. Mit einer solchen Neuerung könnte PEPC-B als Zusatzmodul zur Berechnung selbstkonsistenter Felder an bestehende Programme gekoppelt werden. Hierfür würden die bereits in Abschnitt 2.2.4.1 erfolgreich eingesetzten neuen Schnittstellen zur Teilchendatenübertragung zur Verfügung stehen.

Des Weiteren zeigen Ergebnisse wie die aus dem Kapitel über das Hintergrundreibungsmodell 5.2.4, dass weitere physikalische Gegebenheiten, wie etwa Ionisationsprozesse oder Wechselwirkungen mit einem elektrisch neutralen Hintergrund direkt nachgerüstet und implementiert werden können. Um dies weiter zu forcieren, müssten weitere Stoßprozesse und ihre Raten zusammengetragen und methodengetreu in das Programm eingearbeitet werden.

Auch könnte ein neu zur Verfügung stehender Coulomb-Stoßoperator in seiner originalen Form dazu herangezogen werden, offene Fragen im Bereich der *Thermoeffekte* gesondert von PEPC-B zu beantworten oder als ein Teil nicht linearer Interaktionen mit einem elecktrisch geladenen Plasmahintergrund dienen.

Natürlich muss es auch ein Ziel sein, PEPC-B um ein Modul zu erweitern, welches magnetoinduktive Kräfte selbstkonsistent mitbetrachtet. Eine logische Vorgehensweise diesbezüglich könnte mittels der sogenannten *Darwinschen Approximation* [15, 42, 45, 92] aufgezeigt werden. Im Zusammenspiel mit der neu verfügbaren Information über Gleichgewichtsfelder in TOKA-MAKs könnten mit einer solchen Prozedur wichtige Fragestellungen der Physik von *magnetischen Inseln*, wie sie etwa in TEXTOR beobachtbar sind, erforscht werden. Des Weiteren ist es denkbar, die entsprechende Routine **mesh** [45] so zu erweitern, dass auch stochastisierte Felder [50] in der Randschicht für Simulationen zur Verfügung stehen. Zusammen mit der intrinsischen Stößigkeit könnten, wie schon in (2.2.7) erwähnt, wichtige Erkenntnisse etwa über den 3d Elektronen- und Wolframtransport durch sogenannte "Short Fluxtubes" [49] gewonnen werden.

Mit der Bereitstellung der gitterfreien Doktrin für die Fusionsforschung sind die ersten Schritte auf dem Weg zu einem kompletten Plasma-Rand Simulationsmodell gelegt. Es besteht damit die Möglichkeit, einer logischen Kette von groben Flüssigkeits-Codes über Ionen- oder Neutralgassimulationen in Führungszentrumsnäherung hinzu vollkinetischen Simulationen mittels PEPC-B zu folgen. Ultimativ scheint damit die Entwicklung eines integrierten multiskalen Modells, welches alle drei Ansätze verbindet, möglich.

# Anhang A Beispiel zur Schlüsselberechnung

Um die schwer zu beschreibende Schlüsselberechnung, beziehungsweise das Z-Ordnen zu verdeutlichen, soll hier ein kurzes 2d Beispiel illustriert werden.

Sei also ein Teilchen im  $\mathbb{R}^2$  an der Stelle  $\vec{R} = (3, 1; 3, 6)$  gegeben. Angestrebt wird eine Auflösung bis zu  $n_{lev} = 3$  Leveln, die Kantenlänge der Simulationsbox sei a = 4. Mit der Intervalllänge der höchsten Verfeinerungsstufe  $s = \frac{4}{2^3} = 0, 5$ 

• Die in (2.27) eingeführten Integer-Zahlen sind damit

$$i_x = \text{DIV}\left(\frac{x}{s}\right) = \text{DIV}\left(\frac{3,1}{0,5}\right) = 6$$
  
 $i_y = \text{DIV}\left(\frac{y}{s}\right) = \text{DIV}\left(\frac{3,6}{0,5}\right) = 7$ 

• Ausgedrückt als Bit der Länge n<sub>lev</sub>

$$\begin{aligned} i_x &\doteq 110\\ i_y &\doteq 111 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Bilden der 3 Verschlüsselungs-Tupel (in 3d Tripel) in der Ordnung i<sub>y</sub> → i<sub>x</sub>, und Zusammenfügen zum eigentlichen Schlüssel k (beachte die Farbkodierung aus (A.1)).

$$k = \underbrace{2^{6}}_{\text{Level: 0}} + 0...0 \underbrace{11}_{1} \underbrace{11}_{2} \underbrace{10}_{3}$$
(A.2)

Eine intrinsische Stärke dieser Z-Ordnung liegt nun darin, dass die komplette Baumstruktur, also das entsprechende Blatt und die darüberliegenden Elternknoten, schon komplett in der Binärdarstellung (A.2) des Schlüssels enthalten sind. Dies soll an Skizze (2.3) verdeutlicht werden.



Abbildung A.1: Beispiel für das Z-Ordnen im  $\mathbb{R}^2$ . Die rote, gestrichelte Kurve ist die resultierende Z-Kurve (beachte die Z-artige Linienführung). Der farbig kodierte Schlüssel ist der im Bsp. (A.2) berechnete

## Anhang B

## **Ergänzungen zur numerischen Integration**

### **B.1** Grundlegende Aussagen und Begriffe

Da sich jede Differentialgleichung (DGl) höherer Ordnung auf ein System erster Ordnung transformieren lässt [55], genügt es hier, die Theorie der numerischen Integrationsverfahren für Systeme erster Ordnung zu veranschaulichen.

Hierfür sei ein System aus n gewöhnlichen Differentialgleichung (DGl) einer Veränderlichen gegeben

$$y'(t) = f(t, y(t))$$
 (B.1)

Oder einfacher

$$y' = f(t, y) \tag{B.2}$$

Wobei

$$y(t) := \begin{pmatrix} y_1(t) \\ \dots \\ y_n(t) \end{pmatrix} \; ; \; y'(t) := \begin{pmatrix} y'_1(t) \\ \dots \\ y'_n(t) \end{pmatrix} \; ; \; f(t, y(t)) := \begin{pmatrix} f_1(t, y_1(t), \dots, y_n(t)) \\ \dots \\ f_n(t, y_1(t), \dots, y_n(t)) \end{pmatrix}$$

Ein einfacher Satz aus der Mathematik besagt nun

Satz B.1.1 (Existenz und Eindeutigkeit) Gegeben das Anfangswertproblem (AWP)

$$y' = f(t, y); y(t_0) = y_0 \text{ für } t \in [a, b]$$
 (B.3)

sowie das Streifengebiet

$$\mathcal{S} := \left\{ \begin{pmatrix} t \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+1)} : t \in [a, b] ; y \in \mathbb{R}^n \right\}$$

Ist die Funktion f auf S lipschitzstetig bezüglich y so besitzt das AWP (B.3) für alle  $\begin{pmatrix} t_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \in S$  eine eindeutige Lösung  $y(t) \in C^{(1)}([a, b])$ .

Der Beweis für diese Aussage beruht auf einer Rückführung des Problems auf den Fixpunktsatz von Banach und kann in der einschlägigen Fachliteratur [54] nachgelesen werden. Für die Anwendung, wie sie hier zum Zuge kommen soll, bleibt noch zu erwähnen, dass das AWP (B.3) fast ausschließlich einer Bewegungsgleichung entsprechen wird. Dies bedeutet y(t) steht für eine Teilchengeschwindigkeit und f(t, y(t)) für ein Kraftgesetz, wie etwa die Lorentz-Kraft. Für diese Kräfte ist eine Lipschitz-Bedingung stets einfach nachzurechnen. Man kann also die Voraussetzungen für obigen Satz als stets gegeben annehmen und von der eindeutigen Lösbarkeit der gestellten Probleme ausgehen.

Nachdem der mathematische Rahmen abgesteckt wurde, soll nun das Augenmerk auf numerische Lösungsverfahren gelegt werden. Hierfür wird im Folgenden t als Zeitkoordinate interpretiert werden. Zur numerischen Lösung des Problems wird das Zeitintervall  $t \in [a, b]$  in ein *Punktgitter* 

$$\mathcal{I}_h := \{t_1, ..., t_N\} \text{ mit } a \leq t_1 < ... < t_N \leq b$$
(B.4)

zerlegt.

Die Schrittweite

$$h_i := t_{i+1} - t_i \tag{B.5}$$

muss dabei nicht zwangsweise äquidistant gewählt werden. Um die Notation nicht unnötig zu verkomplizieren, wird im Folgenden der Index *i* jedoch weggelassen. Mit der numerischen Lösung des AWP (B.3) bezeichnet man eine *Gitterfunktion* 

$$u(t,h): \mathcal{I}_h \to \mathbb{R}^n$$
, (B.6)

welche die exakte Lösung y(t) auf  $\mathcal{I}_h$  möglichst gut approximiert. Dabei wird bis auf Weiteres die abkürzende Schreibweise  $u_i := u(t_i, h)$  beziehungsweise  $y_i := y(t_i)$  verwendet.

**Definition 1** Unter einem *Einschrittverfahren* zur Gewinnung einer Gitterfunktion für (B.3) versteht man eine Zuordnungsvorschrift der Bauart

$$u_0 = y_0$$

$$u_{i+1} = u_i + h \cdot \Phi(t_i, u_i, h) \tag{B.7}$$

Die Funktion  $\Phi(t_i, u_i, h)$  wird dabei als Verfahrens- oder Prozessfunktion bezeichnet.

Generell ist zu bemerken, dass  $\Phi$  im allgemeinen noch von f abhängt. Dies wird aber hier einer weitverbreiteten Konvention folgend nicht ausdrücklich aufgeführt. Obige Definition (1) ist hier aus rein didaktischen Gründen für *explizite* Einschrittverfahren formuliert. Sie kann ohne Weiteres auch auf *implizite* Verfahren erweitert werden. Zusätzlich ist es entscheidend, dass die komplette rechte Seite in Definition 1 ausschließlich von  $t_i$  und  $u_i$ , also von dem direkt vorangegangenen Zeitschritt abhängt. Bei *Mehrschrittverfahren* kann diese Abhängigkeit dann entsprechend auf mehrere zuvor erfolgte Zeitpunkte ausgedehnt sein.

Das einfachste aller Einschrittverfahren ist wohl das *explizite Euler -Verfahren*. Fordert man  $y(t) \in C^{(2)}([a, b])$  so lässt sich y(t) in einer Taylorreihe entwickeln, welche man nach dem ersten Glied abbricht (siehe etwa [93]). Man erhält so

$$u_0 := y_0$$
  
 $u_{i+1} = u_i + h \cdot f(t_i, u_i, h)$  (B.8)

Der Vergleich mit (1) macht für die Prozessfunktion die Identität  $\Phi(t_i, u_i, h) = f(t_i, u_i, h)$  deutlich.

Zur generellen Bewertung von Einschrittverfahren sollen nun einige Begriffe eingeführt und erläutert werden. Als erste Größe soll hier der *lokale Diskretisierungsfehler*, wie er in [55] definiert wird, eingeführt werden.

**Definition 2** Sei  $\tilde{u}_{i+1}$  das Ergebnis des (i + 1)-ten Approximationsschrittes eines beliebigen, numerischen Lösungsverfahrens. Wobei der Ausgangswert  $(t_i, u_i) = (t_i, y(t_i))$ , also der Wert der exakten Lösung y(t) des zugrundeliegenden AWP an der Stelle  $t_i$ , sei. Mit

$$\tau(t_{i},h) := \frac{y(t_{i}+h) - y(t_{i})}{h} - \frac{\widetilde{u}_{i+1} - y(t_{i})}{h} ; h \neq 0$$
$$= \frac{y(t_{i}+h) - \widetilde{u}_{i+1}}{h}$$
(B.9)

bezeichnet man den **lokalen Diskretisierungsfehler**. Speziell für Einschrittverfahren gilt nach Definition 1

$$\tau(t_i, h) = \frac{y(t_i + h) - y(t_i)}{h} - \Phi(t_i, y(t_i), h)$$
(B.10)

Der lokale Diskretisierungsfehler vergleicht also das Inkrement der exakten Lösung mit dem der numerischen ausgehend von einem Datenpunkt auf der wahren Lösungskurve (t, y(t)) des AWP.

Von einem wohl gewählten Verfahren verlangt man nun

$$\lim_{h \to 0} \tau(t_i, h) = 0 \tag{B.11}$$

(B.10) folgend ist dies äquivalent zu

$$\lim_{h \to 0} \Phi(t_i, y(t_i), h) = \lim_{h \to 0} \frac{y(t_i + h) - y(t_i)}{h} = y'(t_i) = f(t_i, y)$$
(B.12)

Dies führt auf nachstehende Definition

**Definition 3** Man nennt  $\Phi$  beziehungsweise das zugehörige Einschrittverfahren konsistent, falls gilt

$$\lim_{h \to 0} \Phi(t, y, h) = f(t, y) \; ; \forall (t, y) \in \mathcal{S} \tag{B.13}$$

Man sieht an dieser Definition, dass die Konsistenz, wie sie hier eingeführt wurde, genau wie in anderen Bereichen der Numerik eine Art Verknüpfung zwischen dem Problem und dem numerischen Algorithmus wiedergibt. Anders ausgedrückt gewährleistet die Eigenschaft der Konsistenz eines Verfahrens, dass es das eigentliche, gestellte Problem und nicht ein anderes löst. Man verfeinert diese Aussage oftmals mit der quantitativen Einführung der *Ordnung* eines Verfahrens

**Definition 4** Man spricht von einem Verfahren der (Konsistenz-)Ordnung 
$$p \in \mathbb{N}$$
 falls  
 $\tau(t, y, h) = \mathcal{O}(h^p); \forall (t, y) \in \mathcal{S}$  (B.14)

<u>Bemerkung</u>: Anhand der hier vorgenommenen Definitionen kann es zu Verwirrungen bezüglich der Klassifizierungen von numerischen Verfahren kommen. An Gleichung (B.9) sieht man, dass die Konsistenzordnung gerade der Diskretisierungsfehler  $|y(t_i + h) - \tilde{u}_{i+1}|$  geteilt durch die Schrittweite h ist. Damit ist klar, dass die Fehlerordnung (nicht die Ordnung des lokalen Diskretisierungsfehlers) um eins höher liegt als die Konsistenzordnung. Wenn also von der Ordnung eines Verfahren die Rede ist, so muss stets darauf geachtet werden, ob die Konsistenz- oder Fehlerordnung adressiert wird.

## **B.2** Berechnung von $\vec{t}$

Um den Betrag von  $\vec{t}$  zu ermitteln, setzt man gemäß (3.32) an

$$\begin{aligned} \vec{v}_{+} - \vec{v}_{-} &= \vec{v}' \times \vec{s} \quad \stackrel{(3.33)}{=} \quad \alpha \cdot \vec{v}' \times \vec{t} \\ \stackrel{(3.19)}{\Leftrightarrow} \vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp} &= \alpha \cdot \vec{v}'^{\perp} \times \vec{t} \\ \Leftrightarrow \left( \vec{v}_{+}^{\perp} - \vec{v}_{-}^{\perp} \right)^{2} &= \alpha^{2} \cdot v'^{2} t^{2} \\ \vec{v}_{+}^{\perp 2} - 2\langle \vec{v}_{+}^{\perp}, \vec{v}_{-}^{\perp} \rangle + v_{-}^{\perp 2} \quad \stackrel{\text{Abb.}}{=} \stackrel{(3.5)}{=} \quad \alpha^{2} \cdot \left( v_{-}^{\perp 2} + \left( \vec{v}_{-}^{\perp} \times \vec{t} \right)^{2} \right) t^{2} \\ \vec{v}_{+}^{\perp 2} - 2v_{+}^{\perp} v_{-}^{\perp} \cos(\Theta) + v_{-}^{\perp 2} &= \alpha^{2} \cdot \left( v_{-}^{\perp 2} + v_{-}^{\perp 2} t^{2} \right) t^{2} \\ \stackrel{(3.14)}{\Leftrightarrow} 2 v_{+}^{\perp 2} (1 - \cos(\Theta)) &= \alpha^{2} \cdot v_{+}^{\perp 2} (1 + t^{2}) t^{2} \\ \Leftrightarrow 2 \frac{1 - \cos(\Theta)}{t^{2}} \cdot \frac{1}{1 + t^{2}} &= \alpha^{2} \\ \Leftrightarrow 2 \frac{1 - \cos(\Theta)}{t^{2}} \cdot \frac{1}{1 + t^{2}} &= \alpha^{2} \\ \Rightarrow \alpha &= \frac{2}{1 + t^{2}} \end{aligned}$$
(B.15)

Und erhält damit das Ergebnis (3.34)

$$\vec{s} = \frac{2}{1+t^2} \, \vec{t}$$
 (B.16)

# Anhang C Leitende Wand in 1d PIC-Codes

Um zu verstehen, wie in PIC Modellen [26] leitende Wände simuliert werden, startet man bei der Poisson-Gleichung [42]

$$\varepsilon_0 \Delta \phi = -\rho$$
  

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot (-\nabla \phi) = \rho$$
  

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot \vec{E} = \rho$$
(C.1)

wobei  $\varepsilon_0$  die Dielektrizitätszahl des Vakuums und  $\phi$  das elektrostatische Potential ist.



Abbildung C.1: Skizze des Rechengebietes eines eindimensionalen PIC Modells einer Wand bei x = 0

Bezieht man sich auf ein 1d Modell wie in Abbildung (C.1) gezeigt so hat Gleichung (C.1) folgende Form.

$$\varepsilon_0 \cdot \frac{\partial}{\partial x} E = \rho \tag{C.2}$$

Integriert man nun (C.2) in der 1. Zelle vor der Wand (von 0 bis  $1/2\Delta x$  in Abb. (C.1)). So erhält man [94] (vgl. auch Glg. (57) in [26])

$$E_{1/2} = E_{Wand} + \frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^{\Delta x/2} \rho \, dx \tag{C.3}$$

Nutzt man nun für das elektrostatische Feld  $E_{Wand}$  an der Wand bei x = 0 die Relation [42]

$$E_{Wand} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sigma \tag{C.4}$$

mit der Oberflächenladungsdichte  $\sigma$ , so lässt sich Gleichung (C.3) weiter vereinfachen.

$$E_{1/2} = E_{Wand} + \frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^{\Delta x/2} \rho \, dx$$
  
$$= \frac{1}{\varepsilon_0} \sigma + \frac{1}{\varepsilon_0} \int_0^{\Delta x/2} \rho \, dx$$
  
$$\approx \frac{1}{\varepsilon_0} \left( \frac{Q_{Wand}}{A_{Wand}} + \rho_0 \, \frac{\Delta x}{2} \right)$$
(C.5)

Hierbei wurde angenommen, dass die Wandladung  $Q_{Wand}$  auf der Begrenzungsfläche  $A_{Wand}$  gleichverteilt ist. Des Weiteren, bedient man sich der Näherung, dass die Ladungsdichte  $\rho = \rho_0$  in der ersten halben Zelle vor der Wand konstant ist.

Vervollständigt man noch mit der Ableitung auf dem räumlichen Gitter (Abb. (C.1))

$$\phi_0 = \phi_1 + \Delta x \ E_{1/2} \tag{C.6}$$

gelangt man zu

$$\phi_0 = \phi_1 + \frac{\Delta x}{\varepsilon_0} \left( \frac{Q_{Wand}}{A_{Wand}} + \rho_0 \frac{\Delta x}{2} \right)$$
(C.7)

Wobei das Potential  $\phi_1$  am ersten Gitterpunkt sowie die Ladungsdichte  $\rho_0$  direkt vor der Wand von der eigentlichen PIC Prozedur berechnet werden.

## Anhang D

# Ionengeschwindigkeitsverteilung nach Emmert

Die Lösung der Plasma-Schichtgleichung wie sie von Emmert et. al [2] erarbeitet wird, hängt entscheidend von der Quellverteilung der Teilchen im Geschwindigkeitsraum ab. Während für die Elektronen eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung angesetzt wird, werden die Ionen gemäß eines vorzeichenbehafteten Flusses generiert (siehe Abb. (D.1) sowie Glg. (5.28)).



Abbildung D.1: Auf 1 normierte Geschwindigkeitsverteilung der Teilchenquelle nach Emmert et. al [2] mit den physikalischen Parametern aus Szenario I

Weiterhin zeigen Emmert et. al, dass die räumliche Veteilung der Quelle h(x) (Quellenformfunktion aus Abschnitt 5.2.1) für die Lösung unerheblich ist. Um die Lösung der Plasma-Schichtgleichung (Glg. (20) in [2]) darzustellen, erweist es sich als vorteilhaft nicht  $\psi(s)$  sondern  $s(\psi)$  auszuarbeiten. Dabei bedienen sich Emmert et. al der üblichen Notation in dimensionslosen Größen

$$s := \frac{x}{L}$$

$$\psi := -\frac{e \phi}{T_e} \tag{D.1}$$

Wobei x die Richtung senkrecht zur Wand, L die Systemlänge und  $\phi$  das elektrostatische Potential ist. Indem man nun  $\psi$  und nicht s als unabhängige Variable führt, erhält man auch die Ionengeschwindigkeitsverteilung nicht an einer Stelle s sondern bei einem bestimmten Potentialwert  $\psi$ . Die Verteilung, beziehungsweise ihre Wahrscheinlichkeitsdichte, wird nun wie folgt dargestellt.

Zunächst wird die Funktion  $F(\psi)$  definiert

$$F(\psi) := \sqrt{\frac{4}{\pi} \frac{T_i}{T_e}} \exp\left\{-\left(1 + \frac{T_e}{T_i}\right)\psi\right\} D(\sqrt{\psi}) + \operatorname{erf}\left\{\sqrt{\frac{T_e}{T_i}}\psi\right\}$$
(D.2)

Dabei ist, wie schon in Abschnitt 4.7

$$D(x) := \int_0^x \exp\{t^2\} dt$$
 (D.3)

Bezeichnet  $\psi_1$  das Potential an der Schichtkante und  $\psi_2$  das Potential an der Wand (zu deren Bestimmung konsultiere Abschnitt 5.2.1) so sieht man anhand von Gleichung (4.80) aus Abschnitt 4.7 die Eigenschaften

$$F(\psi_1) = 1 \text{ und } F(0) = 0$$
 (D.4)

Über  $F(\psi)$  wird weiter die Funktion

$$H(\psi) = \begin{cases} 1 + F(\psi) & , v_0 < v_x^i \\ 1 + F(\psi) - 2F(\psi_0) & , 0 < v_x^i < v_0 \\ 1 - F(\psi) & , v_x^i < 0 \end{cases}$$
(D.5)

definiert. Wobei

- $\psi_0 := \psi(s_0) = \psi \frac{m_i (v_x^i)^2}{2T_e}$ : Die Differenz zwischen kinetischer und potenieller Energie
- $v_0 := \sqrt{\frac{2}{m_i}T_e \psi}$ : Die Geschwindigkeit, welche ein Ion inne hat, wenn es reibungsfrei einen Potentialwall der Größe  $\psi$ , heruntergefallen" ist (vgl. auch Glg. (5.9))

sind. Mit dieser Nomenklatur stellt sich die gesuchte Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_{\psi}(v_x^i) := f\left(s(\psi), v_x^i\right) \tag{D.6}$$

für einzahlig geladene Ionen der Masse  $m_i$  bei einem Potentialwert  $\psi$  wie folgt dar

$$f_{\psi}(v_x^i) = \mathcal{N} \left(\frac{m_i}{2\pi \cdot T_i}\right)^{1/2} \exp\left\{\frac{T_e}{T_i} \psi_0\right\} \cdot H(\psi) \tag{D.7}$$

 $\mathcal{N}$  ist dabei die Normierungskonstante der Verteilung. In den vorliegenden Anwendungen wurde für  $\psi < \psi_2$  die Konstante  $\mathcal{N}$  stets so gewählt, dass

$$1 = \int_0^\infty f_\psi(v_x^i) \, dv_x^i \tag{D.8}$$

ist. Analog zu Abbildung (6) in [2] ist die Wahrscheinlichkeitsdichte (D.7) für verschiedene Potentialwerte  $\psi$  in Abbildung (D.2) aufgetragen.



Abbildung D.2: Ionengeschwindigkeitsverteilungen nach Emmert et. al [2] mit den physikalischen Parametern aus Szenario I

Die Verteilung direkt an der Wand ( $\psi = \psi_2$  vgl. Abb. (D.2)) entsteht dabei aus einer linearen Transformation die sich auf folgender Überlegung gründet:

An der Schichtkante gibt es keine rückläufigen Ionen also ist dort die Mindestgeschwindigkeit  $v_x^i = 0$ . Wenn die Ionen die Wand erreichen haben sie reibungsfrei den Potentialwall der Schicht  $(\psi_2 - \psi_1)$  durchlaufen. Somit ist die Mindestgeschwindigkeit  $v_{min}$  der Ionengeschwindigkeitsverteilung an der Wand

$$v_{min} = \sqrt{\frac{2 \ eT_e}{m_i} \left(\psi_2 - \psi_1\right)}$$
 (D.9)

Mit der gleichen Überlegung folgt aus der Energie<br/>erhaltung die Ionengeschwindigkeit $v^i_{xw}$  an der Wand

$$v_{xw}^i = \sqrt{(v_x^i)^2 + v_{min}^2}$$
 (D.10)

Wobei  $v_x^i$  die Ionengeschwindigkeit an der Schichtkante ist. Mit diesem Zusammenhang gilt für die Ionenverteilung  $f_w(v_{xw}^i)$  an der Wand

$$f_w\left(v_{xw}^i\right) = f_{\psi_1}\left(v_x^i\right) \tag{D.11}$$

Wobei  $f_{\psi_1}(v_x^i)$  die untransformierte Funktion aus Gleichung (D.7) an der Stelle der Schichtkante ( $\psi = \psi_1$ ) ist. Aus den beiden Identitäten (D.10) und (D.11) folgert man insgesamt

$$f_w(v_{xw}^i) = f_{\psi_1}\left(\sqrt{(v_{xw}^i)^2 - v_{min}^2}\right)$$
 (D.12)

Nun ist nur noch zu beachten, dass die Normierung (D.8) zu

$$1 = \int_{v_{min}}^{\infty} f_{\psi_1} \left( \sqrt{(v_{xw}^i)^2 - v_{min}^2} \right) \, dv_{xw}^i \tag{D.13}$$

abgeändert wird.

## Literaturverzeichnis

- [1] C. K. Birdsdall and A. B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Adam Hilger, 1991.
- [2] G. A. Emmert, R. M. Wieland, A. T. Mense, and J. N. Davidson. Electric Sheath and Presheath in a Collisionless, Finite Ion Temperature Plasma. *Phys. Fluids*, 23:803–812, 1980.
- [3] P. C. Stangeby. *The Plasma Boundary of Magnetic Fusion Devices*. Inst. of Physics Pub., 2000.
- [4] K. Heinloth. Die Energiefrage. Vieweg, 2003.
- [5] M. L. Parry, O. F. Canzini, J. P. Palutikof, P. J. van der Linden, and C. E. Hanson. *Climate Change 2007: Impacts, Adaption and Vulnerability*. Cambridge University Press, 2007.
- [6] U. Samm. Controlled Thermonuclear Fusion at the Beginning of a New Era. *Contemporary Physics*, 3:203–217, 2003.
- [7] R. J. Goldston and P. H. Rutherford. *Plasmaphysik*. Vieweg, 1998.
- [8] G. v. Oost and Eckhard Rebhan. Thermonuclear Burn Criteria. In *Ninth Carolus Magnus Summer School on Plasma and Fusion Energy Physics*, pages 16–26, 2010.
- [9] J. Wesson. *Tokamaks*. Clarendon Press, Oxford, 2004.
- [10] M. Van Schoor and Weynants R. R. Fusion Machines. In Ninth Carolus Magnus Summer School on Plasma and Fusion Energy Physics, pages 39–45, 2010.
- [11] ITER-The Way to New Energy. http://www.iter.org.
- [12] K. Ikeda. Progress in the ITER Physics Basis. Nucl Fusion, 47, 2007.
- [13] D. V. Bartlett. The European Fusion Programme. In *Transactions of Fusion Science an Technology: Ninth Carolus Magnus Summer School on Plasma and Fusion Energy Physics*, volume 33E. American Nuclear Society, Feb. 2010.
- [14] A. R. Bell. Computational Simulation of Plasmas. *Astrophysics and Space Science*, 256:13–35, 1998.
- [15] J. M. Dawson. Particle Simulation of Plasmas. *Reviews of Modern Physics*, 55:403–447, 1983.
- [16] HPC-FF. http://www.fz-juelich.de/portal/forschung/information/supercomputer/hpc-ff.

- [17] P. C. Stangeby. A tutorial on Some Basic Aspects of Divertor Physics. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 42:271–291, 2000.
- [18] P. Gibbon. Resistively Enhanced Proton Acceleration Via High-Intensity Laser Interactions With Cold Foil Targets. *Phys. Rev. E*, 72:026411, 2005.
- [19] PEPC. http://www.fz-juelich.de/jsc/pepc/.
- [20] T. G. Northrop. The Adiabatic Motion of a Charged Particle. Intersience, 1963.
- [21] T. Takizuka, K. Tani, M. Azumi, and K. Shimizu. Particle Simulation of Divertor Plasma. *Journal of Nuclear Materials*, 128 & 129:104–110, 1984.
- [22] S. W. Rayment and N. D. Twiddy. Electron Energy Distribution in the Low-Pressure Mercury-Vapour Discharge: The Langmuir Paradox. Proc. Roy. Soc. A, 340:87–98, 1968.
- [23] R. Chodura. Plasma-Wall Transition in an Oblique Magnetic Field. Phys. Fluids, 25:1628– 1633, 1982.
- [24] J. T. Scheuer and G. A. Emmert. A Collisional Model of the Plasma Presheath. *Phys. Fluids*, 1988.
- [25] G. Mittag-Leffler. Nature, page 302, 1885.
- [26] D. Tskhakaya, K. Matyash, R. Schneider, and F. Taccogna. The Particle-In-Cell Method. *Contrib. Plasma Phys.*, 47:563–594, 2007.
- [27] L. Greengard and V. Rokhlin. A fast Algorithm of Particle Simulations. J. Comp. Phys., 73:325, 1987.
- [28] J. Barnes and P. Hut. A Pierachical  $\mathcal{O}(N \log(N))$ . Nature, 324:446, 1986.
- [29] S. Pfalzner and P. Gibbon. *Many-Body Tree Methods in Physics*. Cambridge University Press, 1996.
- [30] A. J. Christlieb, R. Krasny, J. P. Verboncoeur, J. W. Emhoff, and I. D. Boyd. Grid-Free Plasma Simulation Techniques. *IEEE: Transactions on Plasma Science*, 34:149–165, 2006.
- [31] P. Gibbon. PEPC: A Multi-Purpose Parallel Tree-Code. http://www.fzjuelich.de/jsc/pepc/.
- [32] J. K. Salmon and M. S. Warren. Skeletons From the Treecode Closet. Journal of Computational Physics, 111(1):136–155, 1994.
- [33] S. L. W. McMillan and S. J. Aarseth. An  $\mathcal{O}(N \log(N))$  Integration Scheme For Collisional Stellar Systems. *The Astrophysical Journal*, 414:200–212, 1993.
- [34] J. Makino. Treecode with a Special-Purpose Processor. *Publ. Astron. Soc.*, 43:621–638, 1991.
- [35] J. E. Barnes and P. Hut. Error Analysis of a Tree Code. *Astrophysical Journal Supplement Series*, 70:389–417, 1989.

- [36] B. Berberich, D.Reiter, and P. Gibbon. Tree-Code Based Mesh-Free Simulation of a Gas-Puff. Verhandlungen der DPG Frühjahrstagung, 2010. Talk: P 5.6.
- [37] E. Hintz and B. Schweer. Plasma Edge Diagnostic by Atomic Beam Supported Emission Spectroscopy-Status and Perspectives. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 37:A87, 1995.
- [38] M. Lehnen et. al. First Experiments on Massive Gas Injection at JET Consequences for Disruption Mitigation in JET and ITER. In 36th EPS Conference on Plasma Phys. Sofia, June 29- July 3, volume 33E. European Physical Society, 2009.
- [39] M. Z. Tokar. Fluid Approximation of The Bohm Criterium For Plasmas of Several Ion Species. *Contrib. Plasma Phys.*, 34:139–144, 1994.
- [40] M. Z. Tokar. Plasma Behaviour Near Strong Sources of Impurities. Contrib. Plasma Phys., 36:250–254, 1996.
- [41] D. Reiter, M. Baelmans, and P. Börner. The EIRENE and B2-EIRENE Codes. *Fusion Science and Technology*, 47:172, 2005.
- [42] J. D. Jackson. Klassische Elektrodynamik. De Gruyter, 2001.
- [43] L. Xiabo, L. Paul, J. Schaeffer, J. Shillington, and P. S. Wong. On the Versatility of Parallel Sorting by Regular Sampling. *Parallel computing*, 1993:1079, 1993.
- [44] M. S. Warren and J. K. Salmon. A Parallel Pashed Oct-Tree N-Body Algorithm. Proc. Supercomput., pages 12–21, 1993.
- [45] P. Gibbon, R. Speck, A. Karmakar, L. Arnold, W. Frings, B. Berberich, D. Reiter, and M. Masek. Progress in Mesh-Free Plasma Simulation With Parallel Tree Codes. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 38(9), 2010.
- [46] K. Matyash, R. Schneider, R. Sydora, and F. Taccogna. Application of a Grid-Free Kinetic Model to the Collisionless Sheath. *Contrib. Plasma Phys.*, 48:116–120, 2008.
- [47] T. Takizuka and H. Abe. A Binary Collision Model for Plasma Simulation with a Particle Code. *Journal of Computational Physics*, 25:208, 1977.
- [48] A. Karmakar. *Theory and Simulations of Nonlinear and Inelastic Processes in Relativistic Laser Plasma Interactions*. PhD thesis, Heinrich-Heine Universität, Düsseldorf, 2008.
- [49] O. Schmitz et al. Identification and Analysis of Transport Domains in the Stochastic Boundary of TEXTOR-DED for Different Mode Spectra. *Nuclear Fusion*, 48(2):024009, 2008.
- [50] K. H. Finken, S. S. Abdullaev, M. Jakubowski, and M. Lehnen. *The Structure of Magnetic Field in the TEXTOR-DED*. Forschungszentrum Jülich, Zentralbibliothek, Verlag, 2005.
- [51] A. Loarte. Fusion Plasmas: Chaos Cuts ELMs down to size. *Nature Physics*, 2:369–370, 2006.
- [52] H. Stoschus et al. Journal of Nuclear Materials, pages (In Press, Corrected Proof), 2010.
- [53] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. *Geometric Numerical Integration*. Springer, 2002.
- [54] W. Walter. Gewöhnliche Differentialgleichungen. Springer, 2000.

- [55] J. Stoer and R. Bulirsch. Numerische Mathematik 2. Springer, 2000.
- [56] J. P. Boris. Relativistic Plasma Simulation-Optimization of a Hyprid Code. *Proc. 4th Conf. on Num. Sim. Plasmas; Naval Res. Labs, Washington DC*, 1970.
- [57] D. S. Filippychev. Application of the Particle-In-Cell Method for Numerical Simulation of Sheath Plasma. *Computational Mathematics and Modeling*, 9:304–326, 1998.
- [58] S. E. Parker and C. K. Birdsall. Numerical Error in Electron Orbits with Large  $\omega_{ce} \Delta t$ . J. *Comp*. *Phys*, 97:91–102, 1991.
- [59] Vu and Brackbill. Accurate Numerical Solution of Charged Particle Motion in a Magnetic Field. *J. Comp. Phys.*, 116:384–387, 1995.
- [60] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Grosche, V. Ziegler, and D. Ziegler. *Teubner-Taschenbuch der Mathematik.* B.G.Teubner, 1996.
- [61] J. D. Huba. NRL Plasma Formulary. Naval Research Laboratory, 2006.
- [62] J. Berkowitz and C. S. Gardner. On the Asymptotic Series Expansion of the Motion of a Charged Particle in Slowly Varying Fields. *Communs. Pure and Appl. Math*, 12:501–512, 1958.
- [63] M. Kruskal. *The Gyration of a Charged Paticle*. Project Matterhorn Rept. PM-S-33 (NYO-7903). Princeton University, 1978.
- [64] W. W. Lee and H. Okuda. A Simulation Model of Studying Low-Frequency Microinstabilities. J. Comput. Phys., 26:139–152, 1978.
- [65] Y. Liu. Fast Multipole Boundary Element Method. Cambridge University Press, 2009.
- [66] K. U. Riemann. The Bohm Criterion and Sheath Formation. J. Phys. D, 24:493–518, 1991.
- [67] F. F. Chen. *Plasma Physics and Controlled Fusion*. Plenum Press New York and London, 1974.
- [68] K. U. Riemann. The Influence of Collisions on the Plasma Sheath Transition. *Phys. Plasmas*, 4:4158–4166, 1997.
- [69] K. U. Riemann. Kinetic Analysis of the Collisional Plasma-Sheath Transition. J. Phys. D, 34:2811–2820, 2003.
- [70] P. C. Stangeby. The Bohm-Chodura Plasma Sheath Criterion. *Phys. Plasmas*, 2:702–706, 1995.
- [71] L. A. Schwager and C. K. Birdsall. Collector and Source Sheaths of a Finite Ion Temperature Plasma. *Phys. Fluids B2*, 2:1057–1068, 1990.
- [72] R. J. Procassini, C. K. Birdsall, and E. C. Morse. A Fully Kinetic, Self-Consistent Particle Simulation Model of the Collisionless Plasma-Sheath Region. *Phys. Fluids B*, 2:3191– 3205, 1990.
- [73] D. Bohm. *The Characteristics of Electrical Discharges in Magnetic Fields*. McGraw-Hill, New York, 1949.

- [74] R. C. Bissell. The Application of the Generalized Bohm Criterion to Emmert's Solution of the Warm Ion Collisionless Plasma Equation. *Phys. Fluids*, 30:2264–2265, 1987.
- [75] E. R. Harrison and W. B. Thompson. The Low Pressure Symmetric Discharge. *Proc. Phys. Soc.*, 74:145–152, 1959.
- [76] L. S. Hall. Harrison-Thompson Generalization of Bohm's Sheath Condition. Proc. Phys. Soc., 80:309–311, 1962.
- [77] K. U. Riemann. Bohm's Criterion and Plasma-Sheath Transition. *Contrib. Plasma Phys.*, 36:19–28, 1996.
- [78] K. N. Kudin and G. E. Scuseria. Revisiting Infinite Lattice Sums With Periodic Fast Multipole Method. J. Chem. Phys., 121:2886–2890, 2004.
- [79] R. C. Bissell and P. C. Johnson. The Solution of the Plasma Equation in Plane Parallel Geometry With a Maxwellian Source. *Phys. Fluids*, 30:779–786, 1987.
- [80] A. Tsushima and Y. Saitou. Sheath-Plasma Criterion of Fluid Theory with Finite Ion Temperature. J. Phys. Soc. Jpn., 80:0450011–0450012, 2011.
- [81] L. Tonks ans I. Langmuir. A General Theory of the Plasma of an Arc. *Physical Review*, 15:876–922, 1929.
- [82] xmgrace. http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/.
- [83] R. C. Bissell, P. C. Johnson, and P. C. Stangeby. A review of models for collisionless onedimensional plasma flow to a boundary. *Phys. Fluids*, 5:1133–1139, 1989.
- [84] D. Reiter. The EIRENE Code User Manual. http://www.eirene.de/manuals/eirene/eirene.pdf.
- [85] R. K. Janev, W. D. Langer, Jr. K. Evans, and Jr. D. E. Post. *Elementary Processes in Hydrogen-Helium Plasmas*. Springer, 1987.
- [86] K. U. Riemann. Theory of the Collisional Presheath in an Oblique Magnetic Field. *Phys. Plasmas*, 1:552–558, 1993.
- [87] Q. Gao and X. Chen. Subsonic Ion Flow at the Presheath Entrance in Tokamak Divertors. *Phys.Plasmas*, 10:1389–1394, 2002.
- [88] U. Krengel. Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik. Vieweg, 2000.
- [89] G. Bamberg and F. Baur. *Statistik*. Oldenburg, 1982.
- [90] J. Hartung. Statistik. Oldenburg, 1999.
- [91] JR. B. D'Agostino and M. A. Stephens. Goodness-Of-Fit-Techniques. Dekker, 1986.
- [92] D. W. Hewett. Elimination of Electromagnetic Radiation in Plasma Simulation: The Darwin or Magnetoinductive Approximation. *Space Sci. Rev.*, 42:29–40, 1985.
- [93] K. Strehmel and R. Weiner. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*. Teubner Studienbücher, 1995.
- [94] D. Tskhakaya. Private Communication, February 2011.

#### Erklärung:

Die hier vorgelegte Dissertation habe ich eigenhändig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt. Die Dissertation wurde in der vorgelegten oder in ähnlicher Form noch bei keiner anderen Institution eingereicht. Ich habe bisher keine erfolglosen Promotionsversuche unternommen.

Benjamin Berberich

Düsseldorf, den 9. März 2012
## Danksagungen

Zum Abschluss dieser Arbeit möchte ich die Gelegenheit nutzen, allen Menschen zu danken, die zum Gelingen dieser Dissertation beigetragen haben.

Den größten akademischen Dank schulde ich zweifellos Herrn Prof. Dr. Detlev Reiter und Herrn PD. Dr. Paul Gibbon, welche sich in gleichen Maßen die Betreuung dieses Projekts teilten. Ich danke Ihnen für die wissenschaftliche Führung durch diese Arbeit.

Des Weiteren ist es mir ein Anliegen, Herrn Prof. Dr. Alexander Pukhov für den Zweitbericht zu danken. Auch möchte ich nicht versäumen, Herrn Dipl. Phys. Mathias Winkel für die Arbeit am Modul für die periodischen Ränder, wie es in Abschnitt (4) zur Anwendung kam, sowie Herrn Stillianos Luka, der im Rahmen des Gaststudenten-Programms 2010 half, den Führungszentrumsintegrator aus Paragraph (3.4.1) mitzuentwickeln, meinen Dank auszusprechen.

Gesondert möchte ich auch meinem Dank gegenüber Dr. Dirk Reiser für sehr fruchtbare Diskussion über das Leben im Allgemeinen und die kinetische Stoßtheorie im Speziellen, zum Ausdruck bringen.

Überhaupt ist es mir ein Anliegen, allen Mitarbeitern des *Jülich Super Computing Centre (JSC)* sowie des *Instituts für Energie und Klima 4 (IEK-4)*, deren Unterstützung ich mir immer sicher sein konnte, zu danken. Namentlich möchte ich hier besonders Robert Speck, Ivo Kabadshow, Heinke Frerichs, Miroslaw Zlobinski, Meike Clever, Jan Willem Coenen, Christian Schulz sowie Nadine Baumgarten herausheben. Besonders betont werden soll auch mein Dank an Henning und Nicole Stoschus, die mich mit Ihrer Freundschaft und Ihrem mir entgegengebrachten Vertrauen im höchsten Maße nachhaltig ehrten.

Alle hier erwähnten Menschen trugen auf Ihre Weise dazu bei, dass ich in beiden benannten Instituten eine unbeschreiblich fördernde Arbeitsatmosphäre vorfand. Des Weiteren sorgten sie dafür, dass mich meine Doktorandenzeit in Jülich nicht nur wissenschaftlich, sondern auch in allen Belangen menschlich voran brachte.

Die letzten Worte des Dankes gelten aber den beiden Menschen, denen ich in meinem Leben zweifellos am meisten verdanke: Meinen Eltern Ulrike und Reinhold Berberich. Bis auf den heutigen Tag sind sie für mich Ansprechpartner, Ratgeber und ein nie versiegender Quell an Zuversicht. Es ist ein unglaubliches Gefühl, sich einer so bedingungslosen Unterstützung in allen Lebenslagen sicher sein zu können. Die Dankbarkeit, welche ich dafür empfinde, ist für mich nicht in Worte zu fassen.

Beschließen möchte ich diese Arbeit nun mit den Worten Goethes (Faust II, 5.Akt, V130):

Das Abgesteckte muss sogleich geraten. Auf strenges Ordnen, raschen Fleiß Erfolgt der allerschönste Preis; Daß sich das größte Werk vollende, Genügt ein Geist für tausend Hände.