

Rátaegyütthetők vizsgálata és nyalábevolúció számítása

TDK dolgozat

Szondy Borbála
BSc II. évfolyam, BME GPK

Témavezető:

Dr. Pokol Gergő egyetemi adjunktus
BME Nukleáris Technikai Intézet
Asztalos Örs doktorandusz
BME Nukleáris Technikai Intézet

2016, Budapest

Kivonat

A magfúzióval történő energiatermeléshez magas hőmérsékletű plazmát kell előállítani, ennek stabil összetartása külső mágneses térrel lehetséges. A plazma vizsgálatára hatékony módszer az atomnyaláb emissziós spektroszkópia. A módszer lényege, hogy a plazmába lőtt nagyenergiájú semleges nyaláb atomjai a plazmarészecskékkel való ütközés során gerjesztődnek, és az alapállapotba való visszatéréskor emittált fotonok detektálhatóak. Létrejön egy fényprofil, aminek kiértékelésével következtetni lehet a plazma sűrűségének idő- és térbeli változásaira.

Mivel atomi szintenként az emisszió arányos a nívó populációjával, így ezek ismeretében felépíthető a fényprofil, és így szimulálható a plazma viselkedése a nyaláb mentén. A nívóbetöltöttségeket egy, a sűrűség- és hőmérsékleteloszlásokat is tartalmazó, változó együtthatós differenciálegyenletrendszer megoldásával lehet megkapni, ezt röviden rátaegyenletnek nevezzük. Az együtthatók a reakcióráták, amik a különböző lejátszódó atomi folyamatok reakciógyakoriságát adják meg a hőmérséklet függvényében.

A pontos szimuláció érdekében először a hatáskeresztmetszetek eredetét ellenőriztem, majd magukat a rátákat teszteltem egy általam írt Python nyelvű ábrázoló programmal, ami minden nyalábtípusra, energiára és lehetséges átmenetre kiment a ráták hőmérsékletfüggését különböző csoportosításokban. A kapott eredmények alapján megállapítható a számolt ráták és az elvárt értékek egyezése, és így a feltételek, amelyek mellett biztonsággal használhatóak.

A következő lépés egy numerikus rátaegyenlet-megoldó megírása volt, és a populációbetöltöttségek számolása illetve ábrázolása a nyaláb mentén különböző konfigurációk esetére. A tesztelés során vizsgáltam a módszer számítási hibáját és futásidejét is. A választott nyelv a Python, mely könnyű illeszthetőséget tesz lehetővé, és így elősegíti a RENATE szimulációs kód IDL-ről más programnyelvre való átírásának tervét. Ez a váltás szükséges a RENATE, mint szintetikus diagnosztika, integrálásához nagyobb szimulációs infrastruktúrákba.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
1.1. Fúziós berendezések	3
1.2. Atomnyaláb emissziós spektroszkópia	3
1.3. RENATE szimulációs kód	4
2. Elméleti alapok	7
2.1. Rátaegyütthetők	8
2.2. Rátaegyenletek	8
3. Rátaegyütthetők vizsgálata	12
3.1. Hatáskeresztmetszetek	12
3.2. RENATE által használt ráták	13
3.3. Ráta tesztelő kód	14
4. Rátaegyenlet megoldó	20
4.1. Megoldó konstans paraméterekre	22
4.2. Megoldó valós profilra	24
5. Összefoglaló	25
Kitekintés	26
Köszönetnyilvánítás	27

1. fejezet

Bevezetés

A csillagokat és köztük Napunkat tápláló magfúzió a jövő ígéretes energiaforrása. Ahhoz azonban, hogy a Földön valóban nyereséges reaktorokat tudjunk üzemeltetni, majd következő lépésként ezek hálózatra termelve elláthassák a világot, még sok feladat áll előttünk. A számtalan kihívás között jelentős szerepe van a berendezésben zajló folyamatok megismerésének, hiszen így tudjuk megtalálni az optimális feltételeket.

Munkámmal a fent említett cél elérését szeretném segíteni, mégpedig egy plazmadiagnosztikai módszert, a nyalábemissziós spektroszkópiát támogató szimulációs kód magjának megírásával. Dolgozatom első fejezetében bemutatom a szükséges háttérinformációkat, így röviden a plazmaösszetartás módját, a diagnosztikai módszert, majd a RENATE szimulációt, az általam megkezdett szimulációs rendszer elődjét.

A következő fejezetben kitérek a munkámhoz szorosan kapcsolódó elméleti ismeretekre, így a lehetséges lejátszódó atomfizikai folyamatokra, bevezetem a reakcióráták, és az ütközési sugárzási modell fogalmát, valamint ismertetem a hozzájuk kapcsolódó egyenleteket és jelöléseket.

Ezután vizsgálom a RENATE által használt rátaegyütthetőségeket, ezek eredetét, és kiszámolásának módját, majd bemutatom a ráták tesztelésére írt kódot, és az általa kimentett ábrák segítségével elemzem a ráták hőmérsékletfüggését.

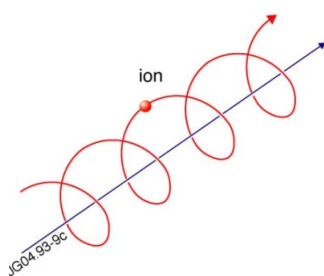
Az utolsó fejezet a nyalábevolúciót számító szimulációs magról szól, bemutatom a rátaegyenlet megoldás módját, és tulajdonságait, illetve kitérel külön a konstans paraméterekre készült modul, és a realiztikus profilra szimuláló változat tulajdonságait, eredményeit.

Az összefoglaló lehetőséget ad a projekt áttekintésére, a megvalósulás értékelésére, a kitékintés alap gondolata pedig a továbbfejlesztés igénye, illetve megemlítek néhány lehetséges alkalmazást.

1.1. Fúziós berendezések

A magfúzió megvalósulásához le kell győzni az atommagok között fellépő Coulomb-taszítást, ehhez pedig igen nagy hőmérsékletre van szükség, földi körülmények között ez 150 millió K nagyságrendbe esik. Ezen a hőmérsékleten a gázok ionizálódnak, plazma halmazállapotba kerülnek. Míg a Napban saját gravitációja elég a részecskék összetartásához, [1] a reaktorban ez az erő nem áll rendelkezésünkre, így más módon kell megoldani a problémát.

A fúziós berendezések közül a mágneses összetartáson alapuló konfigurációk

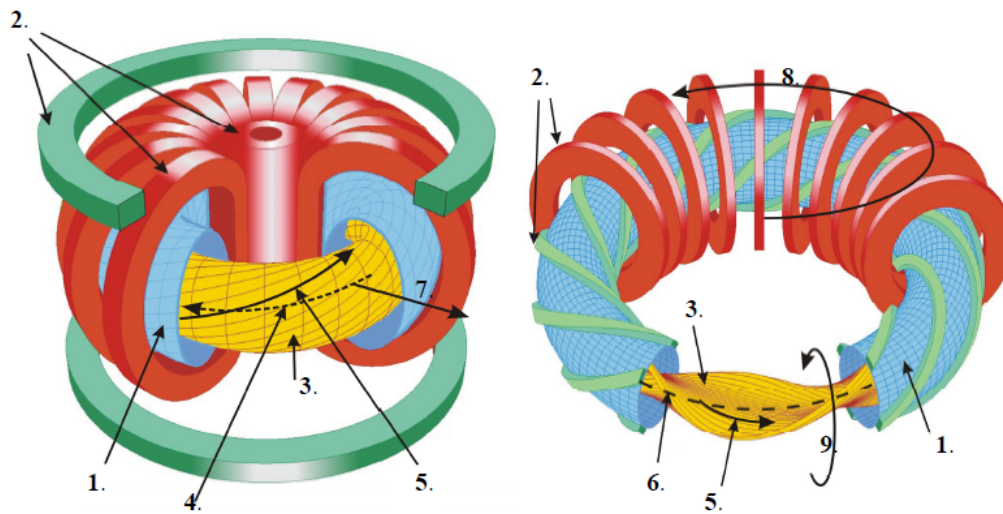


1.1. ábra. A kék nyíl a mágneses erővonalat jelöli, melyek mentén Larmor pályán terjednek a részecskék.

bizonyultak eddig a leghatékonyabbaknak. Az összetartás a plazma azon tulajdonságán alapul, hogy töltött részecskékből áll, így mágneses térrel ezek elteríthetőek. A részecskék Larmor-pályára (1.1) állnak, és gyakorlatilag a mágneses erővonalak mentén mozognak körbe a toroidális vákuum-kamrában [2]. A részecskéket kifelé sodró driftek leküzdésére az erővonalak poloidális megcsavarásával helikális mágneses tér jön létre, és így a részecskék a szélek felé való sodródás helyett poloidális keringést is végeznek a toroidális tengely körül. Az irányokat a 1.2 ábrán láthatjuk két különböző berendezés típusban. A helikális erővonalak létrehozására két módszer fejlődött ki, a sztellarátorokban a mágnesek bonyolult geometriájával oldják meg, a tokamakok esetében pedig toroidális plazmaáram segítségével.

1.2. Atomnyaláb emissziós spektroszkópia

Az atomnyaláb emissziós spektroszkópia (Beam Emission Spectroscopy - BES) [9] az aktív plazmadiagnosztikák közé tartozik, mivel a plazma kívülről indukált hatásra adott válaszát vizsgáljuk. A plazmába nagyenergiájú semleges atomnyalábot löve az ütközések folytán a nyaláb részecskéi fel- vagy legerjesztődnek, illetve ionizáció, és töltéscsere is történhet. Az ütközéses folyamatokon kívül spontán legerjesztődésekkel is számolnunk kell.

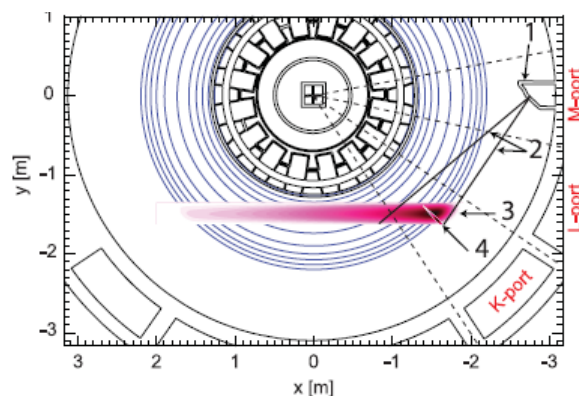


1.2. ábra. Tokamak (balra) és sztellarátor (jobbra) vázlatos rajza. 1. vákuumkamra fala, 2. mágneses tekercsek, 3. plazma, 4. plazmaáram, 5. helikálisan megcsavart mágneses erővonal, 6. mágneses tengely, 7. radiális irány, 8. toroidális irány, 9. poloidális irány [3]

A legerjesztődéskor emittált karakterisztikus hullámhosszú fotonokat detektáljuk, és felépíthetünk belőle egy fényprofil, amely összefüggésben van a plazmaparaméterek idő- és sebességtérbeli eloszlásával. Így például a plazma hőmérsékletprofilja ismeretében az intenzitásból meghatározható az elektronsűrűség. Az eljárás alkalmas a sűrűségfluktuációk mérésére is, ami lehetővé teszi a plazmaturbulenciák és különböző transziens transzportok tanulmányozását [6].

1.3. RENATE szimulációs kód

A RENATE szimulációs kód BES rendszerek fejlesztésére, optimalizálására, illetve kísérleti adatok kiértékelésének elősegítésére lett kifejlesztve a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Nukleáris Technikai Intézete által [5]. A kód magja ütközési-sugárzási modell vagy kvázi-statikuss megközelítés segítségével [6] számolja ki az egydimenziós nyalábevolúciókat, majd ezekből 3 dimenziós nyaláb modellt épít fel. Más hasonló szimulációs kódokkal ellentétben RENATE figyelembe veszi a mérési körülményeket, így a plazmaparaméterek eloszlásán túl a mágneses geometria, a mérési elrendezés, az optikai rendszer tulajdonságait is. Az EAST, a KSTAR, a COMPASS, a JT-60SA, a JET és a TEXTOR tokamak is az implementált berendezések között szerepel.



1.3. ábra. BES megfigyelési elrendezésének felülnézete a KSTAR tokamakon - portok (1 - olyan nyílások a vákuum-kamra falán, amin keresztül hozzáférünk a plazmához), megfigyelési látótér (2), deutérium (3) és lítium (4) nyaláb

[7]

A RENATE fő alkalmazásai a nyalábevolúció és térbeli felbontás számolásán kívül a sűrűségperturbáció válasz számítás, a plazma sűrűségfluktuációinak jelekre gyakorolt hatásának meghatározása, és így a konkrét kísérleti adatokból a fluktuációk visszszámolása. A beépített Doppler-eltolódás számító funkció segítségével megkülönböztethetőek a nyalábemisszióból jelek a háttértől. Például lehetővé teszi a két nyalábbal történő szimultán megfigyelést 1.3, ami a turbulenciák 2 dimenziós megfigyelésénél igen hasznos. [7]

A RENATE kód 10 éve írott IDL nyelven, azóta is folyamatosan tartanak fejlesztéseket, újabb és újabb modulokkal egészül ki. Mivel mára igen átfogó szimulációra képes, felmerült az igény, hogy nagyobb modellező rendszerekbe integráljuk. Első lépésként fontos, hogy támogatott programnyelvre térjünk át IDL-ről, jelenleg a Python tűnik a legmegfelelőbb választásnak. A sok szabadon hozzáférhető modul megkönnyíti a használatot, így egyre több nagy rendszernél alkalmazzák világszerte.

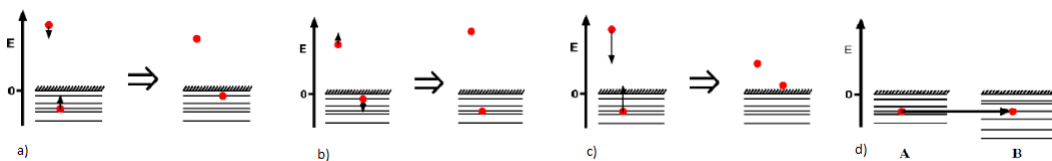
Mivel univerzális, könnyen illeszthető, és főleg korszerű rendszert szeretnénk fejleszteni, nem elegendő a meglévő kódok lefordítása. Alapvető, hogy a bemeneti adatokat megfelelően be tudja venni a program, és hogy tisztában legyünk az új adatokkal végzett számítások potenciális hibáival, korlátaival. Az én feladatomban volt RENATE Python nyelven való újírásának megkezdése, az új rátaegyenletmegoldó mag elkészítése. Mivel a célkitűzések között szerepel az egyértelműség, továbbfejlesztethetőség, alap SI-mértékegységeket használtam, törekszem a kódok olvashatóságára, sokatmondó függvény- és változónevek bevezetésére.

2. fejezet

Elméleti alapok

A szimuláció alapja a plazmarészecskékkel kölcsönható semleges atomnyaláb atomfizikai folyamatainak számítása. A semleges részecskére nézve az ütközéseknek több különböző kimenetele lehetséges. Külső behatásra a nyaláb atomjában a vegyértékelektronok egy külsőbb szintre, magasabb energiájú állapotba kerülhetnek, ez a felgerjesztődés (2.1a), ha az új állapot alacsonyabb energiájú, legerjesztésről beszélünk (2.1b). Jelentős szerepe van még az ionizációnak, ekkor az elektron kötöttről szabad állapotba kerül (2.1c). Az ionütközéses folyamatoknál továbbá előfordulhat, hogy az elektron a nyaláb atomjának kötött állapotából a plazma egy ionjában kerül újra kötött állapotba, ezt töltéscsere folyamatnak nevezzük. (2.1d)

Az egyszerűbb vizsgálat érdekében célszerű egy vegyértékelektronnal rendelkező elemeket választanunk, így hidrogén, deutérium, lítium és nátrium nyalábbal számolunk.



2.1. ábra. A képeken alul a nyaláb atomja látható, nívói energiáinak vázlatos feltüntetésével. Töltött részecskével való ütközés hatására a vegyértékelektronjával különböző események történhetnek. a) felgerjesztődés, b) legerjesztődés, c) ionizáció, d) töltéscsere

2.1. Rátaegyütthetők

A lejátszódó folyamatok reakciógyakoriságát a rátaegyütthetőkkel jellemezzük, ezek nyalábanyagoként, nyalábenségiáknként különbözőek minden átmenettípusra, és erős hőmérsékletfüggésük is van. A rátaegyütthetők a következő képlet alapján számíthatók ki:

$$R = \langle \sigma \underline{v} \rangle = \int \int \int_{R^3} d^3 \underline{v} \sigma(|\underline{v} - \underline{v}_B|) |\underline{v} - \underline{v}_B| f(\underline{v}), \quad (2.1)$$

ahol \underline{v} a plazmarészecske sebességvektora, \underline{v}_B a nyalábrészecske sebességvektora, ezek relatív sebességét kell figyelembe venni. $\sigma(|\underline{v} - \underline{v}_B|)$ az adott reakció hatáskeresztmetszete, ami szintén függ a részecskék sebességkülönbségétől. Az $f(\underline{v})$ a plazmarészecskék sebességtérbeli eloszlását adja meg, a neoklasszikus transzportelmélet [8] alapján ez közelítőleg Maxwell eloszlásnak felel meg. Ha az egyenletet osztjuk a nyalábsebességgel, és beírjuk a közelítő helyettesítést, megkapjuk a redukált rátaegyütthetőt. [3]

$$\frac{R}{v_B} = \frac{1}{v_B} \int \int \int_{R^3} d^3 \underline{v} |\underline{v} - \underline{v}_B| \sigma(|\underline{v} - \underline{v}_B|) \frac{1}{(\sqrt{\pi w})^3} \exp\left(-\left(\frac{v}{w}\right)^2\right) \quad (2.2)$$

ahol $w = (2k_B t/m)^{1/2}$ a plazmarészecske termikus sebessége. A képletek alapján magyarázatot nyert a hőmérsékletfüggés jelentős befolyása, hiszen láthatjuk, hogy minden tagban szerepel a sebesség, amit a termikus energiából egyszerűen átszámíthatunk.

2.2. Rátaegyenletek

A reakcióráták szerepe abban rejlik, hogy segítségükkel leírható a nyalábmenti evolúció időbeli alakulása. Az ütközési-sugárzási modell szerint $m+1$ darab atomi állapot betöltöttségét figyelembe véve a következő differenciál egyenletrendszer [5] írható fel:

$$\begin{aligned}
\frac{dn_i}{dt} = & n_e \left[-n_i \left(\sum_{j=i+1}^m R_{i \rightarrow j}^{e-ex} + \sum_{j=0}^{i-1} R_{i \rightarrow j}^{e-dex} + R_{i \rightarrow +}^{e-ion} \right) + \right. \\
& \left. + \left(\sum_{j=0}^{i-1} n_j R_{j \rightarrow i}^{e-ex} + \sum_{j=i+1}^m n_j R_{j \rightarrow i}^{e-dex} \right) \right] + \\
& + \sum_I n_I \left[-n_i \left(\sum_{j=i+1}^m R_{i \rightarrow j}^{I-ex} + \sum_{j=0}^{i-1} R_{i \rightarrow j}^{I-dex} + R_{i \rightarrow +}^{I-ion} + R_{i \rightarrow +}^{I-CX} \right) + \right. \\
& \left. + \left(\sum_{j=0}^{i-1} n_j R_{j \rightarrow i}^{I-ex} + \sum_{j=i+1}^m n_j R_{j \rightarrow i}^{I-dex} \right) \right] - \\
& - n_i \sum_{j=0}^{i-1} A_{i \rightarrow j} + \sum_{j=i+1}^m n_j A_{j \rightarrow i} \\
& (i = 0, \dots, m)
\end{aligned} \tag{2.3}$$

ami megadja az elektronszintek populációinak időbeli változását.

Az egyenletet úgy írtam fel, hogy megkönnyítse a pythonba való implementációt, ezért a szinteket 0-tól számozom. Mivel nem ezt az egyenletrendszert használom fel, hanem ennek módosított változatát, ahol a függvényváltozókat is jelzem, a következő egyenletrendszer bevezetése után fogom a tagokat részletesen bemutatni.

A nyalábot egydimenziósnek tekintve az eredeti egyenletrendszer (2.3) átírható távolságfüggő egyenletrendszerré (2.4).

$$\begin{aligned}
\frac{dn_i(x)}{dx} = & n_e(x) \left[-n_i(x) \left(\sum_{j=i+1}^m \frac{R_{i \rightarrow j}^{e-ex}(T_e(x))}{v_B} + \sum_{j=0}^{i-1} \frac{R_{i \rightarrow j}^{e-dex}(T_e(x))}{v_B} + \frac{R_{i \rightarrow +}^{e-ion}(T_e(x))}{v_B} \right) + \right. \\
& + \left. \left(\sum_{j=0}^{i-1} n_j(x) \frac{R_{j \rightarrow i}^{e-ex}(T_e(x))}{v_B} + \sum_{j=i+1}^m n_j(x) \frac{R_{j \rightarrow i}^{e-dex}(T_e(x))}{v_B} \right) \right] + \\
& + \sum_I n_I(x) \left[-n_i(x) \left(\sum_{j=i+1}^m \frac{R_{i \rightarrow j}^{I-ex}(T_I(x))}{v_B} + \sum_{j=0}^{i-1} \frac{R_{i \rightarrow j}^{I-dex}(T_I(x))}{v_B} + \frac{R_{i \rightarrow +}^{I-ion}(T_I(x))}{v_B} + \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{R_{i \rightarrow +}^{I-CX}(T_I(x))}{v_B} \right) + \left(\sum_{j=0}^{i-1} n_j(x) \frac{R_{j \rightarrow i}^{I-ex}(T_I(x))}{v_B} + \sum_{j=i+1}^m n_j(x) \frac{R_{j \rightarrow i}^{I-dex}(T_I(x))}{v_B} \right) \right] - \\
& - n_i(x) \sum_{j=0}^{i-1} \frac{A_{i \rightarrow j}}{v_B} + \sum_{j=i+1}^m n_j(x) \frac{A_{j \rightarrow i}}{v_B} \\
& (i = 0, 1, \dots, m)
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Az egyenletrendszerrel n_i , azaz egy adott szint populációjának változását határoztuk meg a megtett távolság(dx) függvényében. A változások felbonthatóak a különböző plazmaalkotókkal való ütközéses, illetve a képlet utolsó sorában található spontán folyamatokból adódó tagokra.

Az A paraméterek az átmenetekhez tartozó Einstein-koefficiensek, ezek adják meg a spontán emisszió gyakoriságát, ezek nem függenek a hőmérséklettől. Az ütközéses tagok is szétválaszthatóak elektronnal való ütközésekre, ahol ezek sűrűségét (n_e) vesszük figyelembe, és különböző ionokkal való ütközésekre. \sum_I azt jelenti, hogy ugyanezen tagokat az összes jelenlévő ionra összegezzük. A negatív előjelek után következnek a veszteségi tagok, vagyis amikor az i -edik szintről elektron távozik, ennek gyakorisága arányos a szint jelenlegi populációjával, ezért itt n_i a szorzó. Az adott szint populációját gyarapító tagoknál annak a szintnek a populációjával kell szorozni, ahonnan az átmenet történt (n_j), majd ezeket a megfelelő szintekre szummázni.

R az előző alfejezetben bemutatott reakciórátaikat jelöli. A felső indexek első tagja arra utal, hogy milyen részecskével való ütközési rátáról van szó, e az elektronütközéses, I a különböző ionütközéses tagokat jelenti. A felső index második tagja megadja az átmenet típusát: felgerjesztés (ex), legerjesztés (dex), ionizáció(ion) vagy töltéscsere folyamatok (CX). Az alsó index azt jelöli, hogy melyik atomi szintről melyikre történt az átmenet, az elektronvesztéses folyamatoknál pedig $i \rightarrow +$ jelölést használunk. A szintek populációbetöltöttségén kívül a a hőmérsékleten keresztül a rátaegyütthatók

is függnnek a távolságtól.

Így a felírt képlet megoldása változóegyütthetős egyenletrendszer lévén nem triviális.

3. fejezet

Rátaegyütthetők vizsgálata

Ahhoz, hogy kizárhassuk az új rátaegyenlet megoldó mag a reakciórátákból adódó szignifikáns hibáját, először ezeket kellett ellenőrizni. A ráták meghatározó paramétere a hatáskeresztmetszet, ezért előbb ezek eredetét kutattam. A RENATE által használt rátaegyütthetők megértéséhez az ezeket kiszámító programrészek működését is fel kellett térképezni. Ahhoz, hogy a különböző folyamatok során a ráták viselkedését tanulmányozhassam, egy a redukált rátaegyütthetőkat a plazmahőmérséklet függvényében ábrázoló programot írtam.

3.1. Hatáskeresztmetszetek

A RENATE által használt hatáskeresztmetszetek nyalábanyagonként eltérő forrásból származnak. Lítiumra a Schweinzer-féle [10], nátriumra az Igenbergs-féle hatáskeresztmetszeteket használjuk, míg hidrogénre és deutériumra a IA-EA ALADDIN [11] és az Open ADAS [12] adatbázisból szereztük be Delabie [13] korrekcióival. [6] A spontán átmenetek hatáskeresztmetszetei a NIST Atomi Spektrum Adatbázisból származnak. [14]

Mivel a lítium hatáskeresztmetszetei kerültek be RENATE-ba először, és ez igen gyakran használt nyalábanyag, az erre vonatkozó publikációk alapján tartottam célszerűnek feltérképezni, hogyan határozták meg a különböző hatáskeresztmetszeteket.

Az Li elektronütközéses folyamatokat konvergens-erőscsatolású (CCC) [15] módszerrel számították. Az így kapott hatáskeresztmetszeteket inelasztikus e-Li szórás kísérletekkel ellenőrizték, és ezek igen pontosnak bizonyultak. a számításokat 45 atomi állapot figyelembevételével végezték, és ezeket 64 állapotot figyelembevévő számításokkal [18] tudták ellenőrizni, hiszen az állapo-

tok számának növelésével a közelítés a valódi értékek felé konvergál. $2s \rightarrow 2p$ átmenetnél ez viszonylag pontos, de magasabb gerjesztett állapotoknál kevésbé, és $n=4$ -es állapotra már nincs is adat. Ezért a magasabb atomi állapotokhoz tartozó hatáskeresztmetszeteket az alacsonyabb állapotokéból skálázzák félempirikus formulák segítségével, vagy Born közelítést használnak. Ugyan ezek az ionizációra is igazak.

A protonütközéses számítások erőscsatolású (CC) [17] módszerrel készültek. Magasabb energiákon a különböző szennyezőkkel történő ütközések várhatóan hasonlóan viselkednek, mert itt már kevésbé befolyásolnak az elektronfelhő tulajdonságai. Így tehát akár elektronütközés hatáskeresztmetszetéből is át lehet számolni.

A $q \geq 2$ töltésekkel való ütközéses felgerjesztésekhez tartozó hatáskeresztmetszeteket szintén CC módszerrel számolták, és néhány ionfajttal folytatott kísérlettel alá tudták támasztani. A számítások és mérések alapján megállapítható, hogy egy bizonyos energia-tömeg arány felett ha a hatáskeresztmetszeteket és az energiákat a töltéssel osztjuk, ezeket a kapott redukált értékeket egymás függvényében ábrázolva hasonló lefutást mutatnak különböző szennyezők esetében. Mivel a szennyezők ütközés közbeni viselkedését a töltésük nagyobb mértékben határozza meg, mint a tömegük, alacsonyabb energiák esetén becsülhetők a hatáskeresztmetszetek az azonos töltésű, de teljesen ionizált szennyező segítségével.

Elektronvesztésnél valamivel bonyolultabban, de szintén bevezethetők az előbb bemutatottakhoz hasonló redukált mennyiségek. A Simula program például külön számol a töltéscsere és inonizációs folyamatokkal, de ezeket az egyszerűsítés kedvéért egy külön, összevont formulát kaphatunk az elektronvesztéses folyamatokra, a RENATE ezzel számol. [3]

Míg ütközéses felgerjesztésnél a szennyezőkkel illetve protonnal való ütközéseket hasonlóan számíthatjuk, az elektronvesztéses folyamatoknál más típusú illesztések tartoznak a két esethez.

3.2. RENATE által használt ráták

A ráták kiszámolását a RENATE szimulációs kódban az atomfizikai kernel erre kialakított programrésze végzi. Bemenetként szükség van a nyalábanyagra, a nyalábenergiára, és a .sav fájlokra, amelyekből kiolvashatók az illesztési együtthatókat tartalmazó fájlok nevei. Az illesztési függvények csak egy bizonyos energiaérték fölött értelmesek, ezért az integrálásnak egy alsó határt kell választanunk, ennek beállítása egy függvény elején történhet meg. A legenerálódott logaritmikus energiaskála pontjaiban a fájlokból kiolvasott illesztési együtthatók segítségével kiszámítja a hatáskeresztmetszeteket, a nyalábse-

besség pedig megállapítható a nyalábenergiából. [3]

Mivel a nyalábevolúciót nem időben, hanem térben számítjuk, redukált rátákat (2.2) használunk.

3.3. Ráta tesztelő kód

A reakcióráták hőmérsékletfüggésének alaposabb vizsgálatához egy ráta tesztelő kódot írtam.

A program megírásánál a jó ábrázoló felület miatt esett a Python nyelvre a választás, de használata során sok más tulajdonsága alapján is ideálisnak bizonyult a fúziós szimulációk kezelésére. A ráta tesztelő kód több dimenziós tömböket tartalmazó fájlokból tölti be az adatokat, majd a redukált rátaegyütthetők hőmérsékletfüggését különböző tulajdonságok alapján csoportosítva színes vonalakkal ábrázolja, és képként kimentti a megadott mappába. A csoportosítások segítségével összehasonlítottam a rátákat nyalábanyag, nyalábenergia, folyamat típusa, illetve az elektronátmenetek szerint.

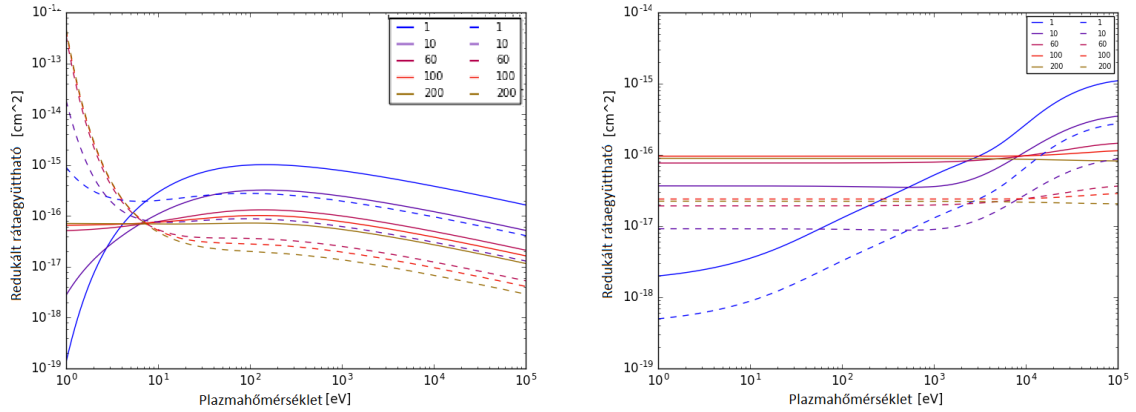
A program elindítása `rate_test_all()` függvény hívásával lehetséges. Beállítható, hogy mely nyalábanyagokra számoljon a program a jelenleg RENATE által tárolt adatok közül (H, D, Li, Na). A kívánt nyalábenergiákat is megadhatjuk, de ha olyan energiájú nyalábra is szeretnénk ábrát, amire nem található fájl, ezeket előbb le kell gyártani a RENATE fent említett rátaegyütthető számító programrészének segítségével. Minden különböző átmenetre futtathatunk, átmenetek angol megnevezését a kód elején elhelyezett ismertetőben megtaláljuk.

Az vizsgált átmeneteket is megadhatjuk, az atomi szinteket 0-tól számozzuk, és közülük legfeljebb annyiadikra ábrázol a program, ahányra van adat, nyalábanyagonként ez eltérő, így hidrogénnél és deutériumnál 6, lítiumnál 9, nátriumnál 8 darab nívó. A figyelembevett szennyezőütközéseket is beállíthatjuk.

Miután definiáltuk, hogy mely bemeneteken menjen végig a program, a függvény hívásával automatikusan kimentődik minden lehetséges kombináció szerinti összehasonlító grafikon.

A kimentett képek közül néhány érdekesebb ábra segítségével bemutatom a ráták elemzésének, a folyamatok értelmezésének menetét.

A deutérium n1-n2 átmenetekről készült 3.1 ábrák közül a bal oldalin az elektronütközéses, a jobb oldalin pedig a protonütközéses folyamatok redukált rátaegyütthetői láthatóak a hőmérséklet függvényében, különböző, az ábrákon színhőmérséklettel érzékeltetett, nyalábenergiákra. A folytonos vo-



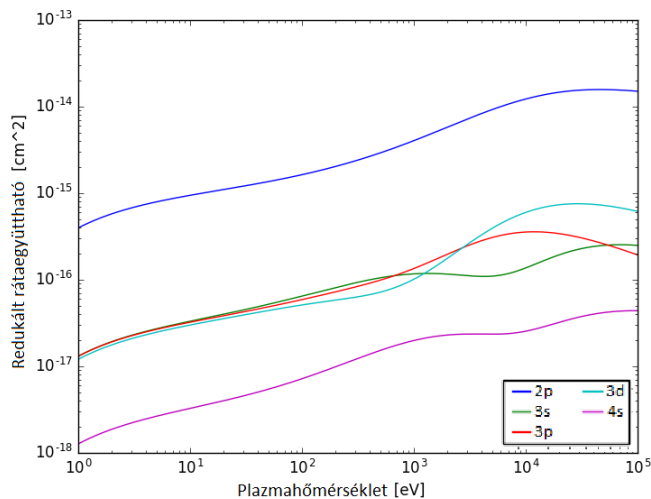
3.1. ábra. Elektron- (balra) és protonüttközéses (jobbra) átmenetek $n1$ és $n2$ szint között különböző energiájú deutérium nyalábokra. A folytonos vonalak felgerjesztést a szaggatottak legerjesztést jelölnék.

nalak felgerjesztéseket, a szaggatottak legerjesztéseket jelölnék.

Elektronüttközéses felgerjesztésnél 60 keV alatt, ahol a nyaláb részecskéinek még nem elegendő a mozgási energiája, jelentős szerepe van a plazmahőmérsékletnek, ennél magasabb energián már nem szignifikáns a ráták hőmérsékletfüggése. Az elektronüttközéses folyamatoknál alacsonyabb hőmérsékleten láthatóan a legerjesztődések gyakorisága magasabb, minden nyalábenergiára egy adott hőmérsékleten, 7 eV környékén kezdenek a felgerjesztődéses folyamatok dominálni. 100 eV hőmérséklettől a ráták nyalábonként hasonló tendenciát mutatnak fel- és legerjesztődésekre.

A 3.1 jobb oldali ábrán jól látható, hogy ezzel szemben protonüttközéseknél végig párhuzamosan futnak a felgerjesztésekhez (folytonos) és legerjesztésekhez (szaggatott) tartozó görbék, valamint hogy nagyobb energiájú nyalábokra a hőmérsékletfüggés elhanyagolható. Érdekes megfigyelés, hogy a 10 keV-es nyalábnál a reakciógyakoriságok éppen 10 keV-es plazma esetén emelkednek a nagyobb energiájú nyalábokra jellemző értékek fölé. Utóbbi jelenség azzal lehet magyarázható, hogy ekkor a nyaláb és a plazma részecskéi azonos sebességgel mozognak, így megnő annak az esélye, hogy kölcsönhatásba lépnek egymással.

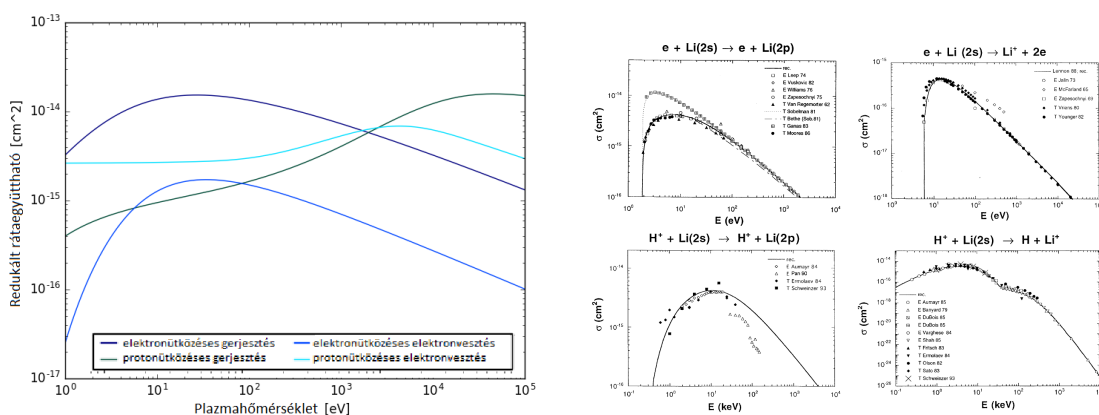
A 3.2 ábrán bal oldalt feltűnő, hogy 10 keV-es lítium nyaláb esetében a 2s nívóról történő felgerjesztések görbéi szépen csoportosulnak főkvantumszámok szerint. Ez fakadhat abból, hogy az elektronszintek energiái hogyan viszonyulnak egymáshoz. A melléte található táblázatban [10, 16] szerepelnek a lítium atomi szintjei közötti energiakülönbségek. Látható, hogy a leg-



$nl-n'l'$	$\Delta E(\text{eV})$
2s-2p	1.847
2s-3s	3.372
2s-3p	3.833
2s-3d	3.877

3.2. ábra. Protonütközéses felgerjesztések rátaegyütthatói 2s szintről különböző szintekre 10 keV-es nyaláb esetén (balra), és az átmenetekhez tartozó energiakülönbségek [16] (jobbra).

könnyebben 2s-ről 2p szintre történik a gerjesztés, ezután a 3.5 eV körüli energiakülönbséghez tartozó nívók következnek, ezek hasonló valószínűséggel töltődnek be, de a plazmahőmérséklet emelkedésével ezek közül a legmagasabb energiájú, 3d szint kezd dominálni.



3.3. ábra. Elektron- és protonütközéses felgerjesztések és elektronvesztések lítium nyalábra (balra), és a hozzájuk tartozó hatáskeresztmetszetek [16] (jobbra)

A 3.3 ábrán szintén lítium nyaláb rátáit láthatjuk. Alacsonyabb hőmér-

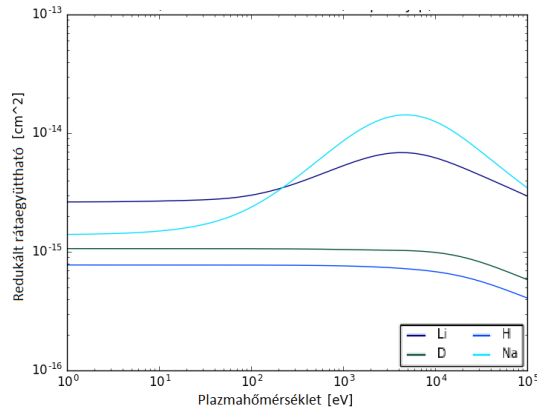
sékletű tartományokban az elektronütközéses felgerjesztések gyakorisága a legmagasabb, majd a hőmérséklet növekedésével a protonütközéses elektronvesztés maximuma után a protonütközéses elektronvesztések kerülnek túlsúlyba. Az elektronütközés által indukált elektronvesztéses folyamatok görbéje szinte végig legalul halad, közelítőleg párhuzamosan az elektronütközéses felgerjesztések görbéjével, mindkettőnek kis plazmahőmérsékleten van maximuma. Jellegre magyarázható ez a jelenség azzal, hogy ugyanolyan plazmahőmérsékleten, tehát ha a részecskének ugyanakkora energiájuk van, az elektronok sokkal gyorsabban mozognak, mint a jóval nagyobb tömegű protonok, vagyis ugyanazt a sebességet alacsonyabb hőmérsékleten képesek elérni. A ráták alakulásának alaposabb megismeréséhez vizsgáljuk meg a 3.3 jobb oldalán található ábrákat a folyamatokhoz tartozó hatáskeresztmetszetekkel. [16] Az elektronütközéses ionizáció legfelső jelölt beosztása 10^{-16} , míg a többi diagramé 10^{-14} cm^2 , ez a nagyságrend beli eltérés a rátaegyütthatóknál is észrevehető volt. Ezen kívül ha megfigyeljük a hatáskeresztmetszet görbék maximumainak sorrendjét, ez elektronütközéses felgerjesztés, protonütközéses ionizáció, majd protonütközéses felgerjesztés, épp úgy, mint az ütközési ráták esetében.

Az anyagok összehasonlítását a 3.4 ábrán láthatjuk protonütközéses elektronvesztések képviselőjében. Más folyamatoknál a különböző nyalábanyagok egymáshoz viszonyított viselkedését vizsgálva hasonló elrendeződést kapunk. Elsőre szembetűnő, hogy a hidrogén típusú anyagoknál ugyanannak az ütközésnek jóval gyengébb hatása van a vegyértékelektronra. Ennek oka, hogy itt nagyon közel van az elektron az atommaghoz, így erősebben kötődik hozzá. A lítiumnál ezzel szemben az 1s héj elektronjai leárnyékolják az atommag protontöbbletéből adódó vonzóerőt, tehát könnyebben megtörténik a felgerjesztés.

Az elektron- és protonütközéses folyamatok feljebb bemutatott hőmérsékletfüggése a legtöbb anyagnál hasonlóan megfigyelhető, de az előbb protonütközéseknél látott 1 és 10 keV-es plazmahőmérséklet közötti felívelés hidrogén és deutérium esetében elmarad, ennek szintén az erősebb kötöttség lehet az oka, saját atommagjukhoz jobban kötődnek, mint amekkora behatást egy kívülről érkező proton tud okozni.

Ha az elektronszintek sorrendjét figyeljük az egyes folyamatok során, hidrogén és deutérium esetén ez szinte állandó, hiszen ezek "bundled-n", kiszámított energiájú meghatározott nívók, de még itt is kereszteződnek néhol a 3n-4n-5n szintek görbéi. Lítium és nátrium nyalábnál viszont jelentősebb változásokat vehetünk észre az energiák függvényében.

A 3.5 ábra szintén protonütközéses elektronvesztésekről készült, a nyaláb



3.4. ábra. *Protonütközéses elektronvesztések különböző nyalábanyagokra H, D, Li, Na*

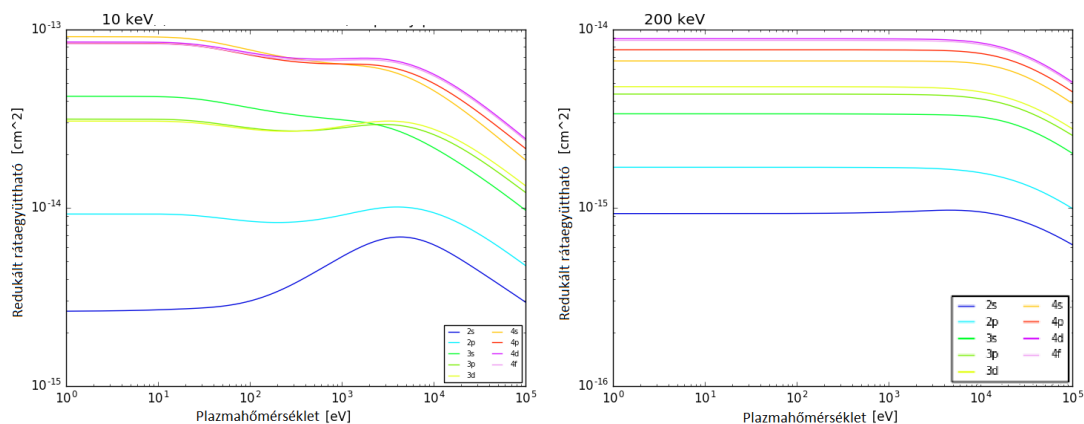
anyaga lítium. Nagy energiájú nyalábnál az elektronszintek szabályos sorrendben követik egymást, gyengébb nyalábnál viszont alacsonyabb hőmérsékleten főkvantumszámoként fordított sorrend figyelhető meg a külsőbb héjaknál (2s, 2p, 3d, 3p, 3s, 4f, 4d, 4p, 4s), mert itt a reakció végbemene- telének valószínűsége még kevésbé függ a szint energiájától, és ezért ezt a degeneráció fokból adódó többlet gyakoriság ellensúlyozni tudja.

A protonütközésekre jellemző emelkedési tartományon cserélődnek vissza a görbék a 200 keV-es nyalábnál látott elrendeződésre, itt már kevesebb jelentő- sége van az adott szinten betölthető helyek számának, mint az energiájának. Ugyanez a megcserélődés elektronütközéseknél máshogy játszódik le, ott in- kább hidegebb plazmában áll fent az eredeti sorrend, és nagyobb hőmérsék- leten történnek az inverziók. Ebből feltételezhető, hogy protonütközéseknél is magas energián a plazmahőmérsékletet tovább emelve újabb felcserélődést tapasztalnánk.

Ezek alapján, illetve további ábrákat vizsgálva számos következtetés von- ható le. A legalapvetőbb, de a megoldó sikeressége szempontjából szükséges megállapítás, hogy a legtöbb várható hatás valóban megjelent valamilyen formában a diagramokon, tehát a .sav-ból hdf5 fájlba való konvertálás és Py- thonnal való beolvasás nem okozott rendellenességeket.

Mivel nagy energiákra a ráták alacsonyabbakból felskálázással készültek, 200 keV fölöttieket nem használtunk eddig sem, de most láthattuk, hogy a 10 keV alatti nyalábokat sem célszerű használni, mert túl nagy a plazmahőmér- séklettől való függés.

A 0 közeli nagyságrendek és a hirtelen ugrásszerű változás miatt 10 eV-os



3.5. ábra. *Protonütközéses elektronvesztés 10 keV-es (balra) és 200 keV-es (jobbra) lítium nyalábra.*

plazmahőmérséklet alatt nem tekinthetőek megbízhatónak a rátaegyütthatók.

Láthattuk továbbá, hogy míg a hidrogén szerű anyagoknál egyértelmű a sorrend, lítiumnál és nátriumnál általában a degeneráció fok erősen befolyásol, viszont ez sem jelent egyértelmű héjankénti inverziót, mert több tényezőtől függ a reakciógyakoriság.

Több különböző szennyezőütközésre is van adatunk, amelyeket szintén vizsgáltam, azonban most nem térek ki erre, mert a megoldóban egyelőre az ionütközéses folyamatokat protonok képviselik, tehát a feladat sikeressége szempontjából a szennyezők viselkedése nem releváns.

4. fejezet

Rátaegyenlet megoldó

Munkám fő célja egy új ütközési-sugárzási modellen alapuló rátaegyenlet megoldó megírása volt.

A nyálábevolúció kiszámításához először fel kell írunk a differenciálegyenletrendszert majd valamilyen módszerrel megoldani. Ennek egyenletenként való betáplálása minden különböző paraméterre vég nélküli folyamat lenne. Így tehát célszerűbb helyfüggő egyenletrendszerünket (2.4) néhány változóval végzett művelet formájában megadnunk a definiált függvényben. Ez úgy valósítható meg, ha ezek a bemenetek vektorok, mátrixok. Az egyenletrendszer a következő alakban írható fel mátrix-műveletként:

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} n_0 \\ n_1 \\ \vdots \\ n_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{00} & C_{01} & \dots & C_{0m} \\ C_{10} & C_{11} & \dots & C_{1m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{m0} & C_{m1} & \dots & C_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_0 \\ n_1 \\ \vdots \\ n_m \end{bmatrix}$$

A differenciálegyenlet megadja minden szint populációváltozását a távolság függvényében, n_i az i -edik szint betöltöttségét jelzi. A C mátrix tagjai úgy helyezkednek el, hogy az i -edik szintről való veszteségi tagok a C_{ii} jelzésű helyeken, azaz a főátlóban legyenek. A többi tagnál i jelzi, hogy hova történik az átmenet, és j , hogy melyik szintről. Ezzel a jelöléssel a legerjesztési tagok a főátló fölé, a felgerjesztési tagok a főátló alá kerülnek.

Ahhoz, hogy a mátrix szorzást elvégezve az eredeti egyenletrendszert kapjuk, a tagokat a következő képletekkel írhatjuk fel:

$$\begin{aligned}
C_{ii} = & -n_e(x) \left(\sum_{j=i+1}^m \frac{R_{i \rightarrow j}^{e-ex}(T_e(x))}{v_B} + \sum_{j=0}^{i-1} \frac{R_{i \rightarrow j}^{e-dex}(T_e(x))}{v_B} + \frac{R_{i \rightarrow +}^{e-ion}(T_e(x))}{v_B} \right) - \\
& - \sum_I n_I(x) \left(\sum_{j=i+1}^m \frac{R_{i \rightarrow j}^{I-ex}(T_e(x))}{v_B} + \sum_{j=0}^{i-1} \frac{R_{i \rightarrow j}^{I-dex}(T_e(x))}{v_B} + \frac{R_{i \rightarrow +}^{I-ion}(T_e(x))}{v_B} + \right. \\
& \left. + \frac{R_{i \rightarrow +}^{I-CX}(T_I(x))}{v_B} \right) - \sum_{j=0}^{i-1} \frac{A_{i \rightarrow j}}{v_B} \\
C_{ij} = & n_e(x) \frac{R_{j \rightarrow i}^{e-ex/dex}(T_e(x))}{v_B} + \sum_I n_I(x) \frac{R_{j \rightarrow i}^{I-ex/dex}(T_I(x))}{v_B} + \frac{A_{j \rightarrow i} |_{j>i}}{v_B}
\end{aligned} \tag{4.1}$$

A differenciálegyenlet megoldására a Python egy programcsomagjából, *scipy* [19] csomagból választottam. A *scipy* kifejezetten tudományos számítások elősegítésére lett kifejlesztve, és további előnye, hogy a *numpy* csomaggal jól használható, tehát több dimenziós tömbök kezelésére is alkalmas.

A *scipy* integrálásra kialakított eszköztárában a számos feladat-specifikus modul között megtalálható egy megoldó általános differenciálegyenlet rendszerekre *odeint* név alatt. Ez a modul valójában egy FORTRAN csomagból származó *lsoda* modult használ a kezdetiérték probléma megoldására. A FORTRAN nyelv kifejezetten ideális numerikus számításokhoz, és tömbökkel való műveleteknél igen gyors. A választott megoldó kitűnően optimalizált, képes automatikusan kiválasztani, hogy az adott problémához melyik megoldási módszert használja, de természetesen ez manuálisan is meghatározható. Az eszköztárában Adams-metódusok 12-ed rendig, retrográd differencia módszerek (angolul backward differentiation method - BDF) 5-öd rendig szerepelnek. [20]

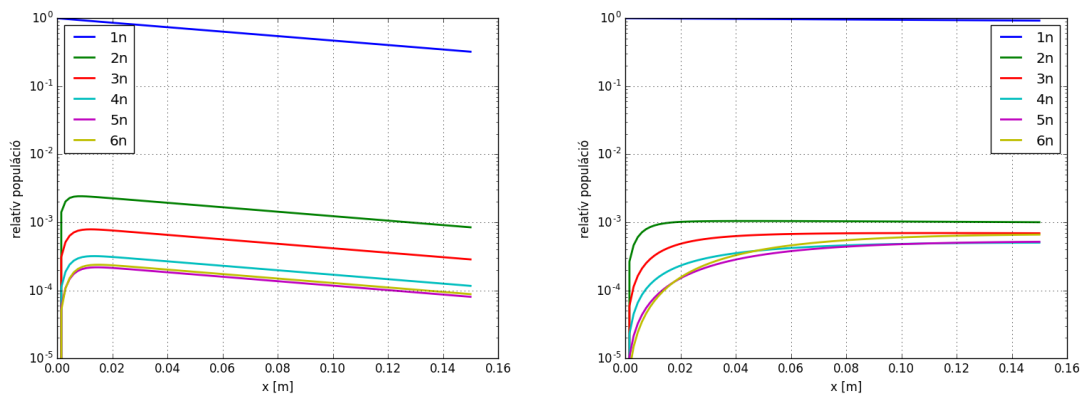
Mivel a differenciálegyenletet expliciten adjuk meg, a $dy/dt = f(t,y)$ formulával írható fel. Itt y vektor is lehet, esetünkben ez a szintenkénti populáció lesz, értéke függ a többi megoldási ponttól, t pedig a választott felosztás, tehát független változó. A függvény megadásakor további változók is bevezethetők, tehát felhasználható az egyenletrendszer megadásakor az előbb bemutatott C mátrix.

Az differenciálegyenletek megoldásához szükség van kezdeti feltételre, ez gyakorlatban azt jelenti, hogy megadjuk a populációk kezdeti állapotát nívónként. Mivel feltételezzük, hogy az atomok alapállapotban érik el a plazmát, a normalizált populáció kezdetben a legalsó atomi szinten 1, a többin 0.

4.1. Megoldó konstans paraméterekre

Első megközelítésben konstans paraméterekre alkalmaztam a megoldót. Ekkor bemenetként a nyalábanyag és nyalábenergián kívül bármilyen konkrét plazmahőmérsékletet és elektronsűrűséget kell megadni. Ha a megadott hőmérsékletre nincs ráta az adatbázisban, a közel eső hőmérsékletek rátái alapján lineárisan interpolál a program.

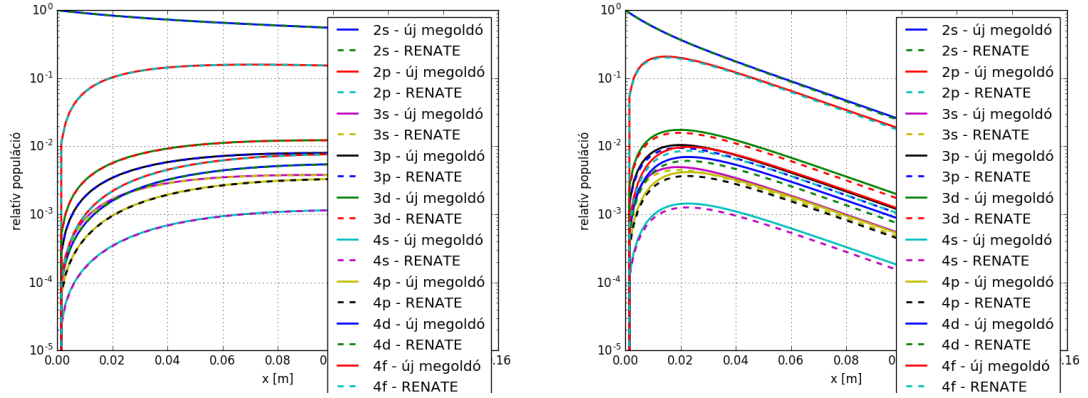
Beállítható továbbá a megfigyelt távolság, az intervallum felosztása és a vizsgált atomi szintek száma, utóbbi alapértelmezetten a maximális, amennyire az adott nyalábanyagnál adatok állnak rendelkezésünkre. (Jelenleg az előző fejezetekben bemutatott számok - H,D:6, Na:8, Li:9 darab nívó.)



4.1. ábra. Deutérium nyalábok evolúciója: 10 keV-es nyaláb nagyobb sűrűségű ($6 \cdot 10^{19} 1/m^3$) és hőmérsékletű (3 keV) plazmában (balra) és 60 keV-es nyaláb kisebb sűrűségű ($10^{19} 1/m^3$) és hőmérsékletű (0.3 keV) plazmában (jobbra).

Ha a rátaegyenlet megoldásait a nyalábmenti pontokban diagramon ábrázoljuk, ahol a relatív populáció tengelye logaritmus, szemléletes eredményt kapunk. A 4.1 ábrán a sűrűbb plazmába lőtt nyaláb esetén a magasabb nívók jobban populációja nagyobb az első centiméteren, mint alacsony sűrűség esetében. Ez logikus, hiszen ekkor a nyaláb atomjainak több plazmarészecskével van esélye ütközésre ugyanakkora távolság megtétele alatt.

A nyaláb energiája is nagyban befolyásolja az evolúciót, 10 keV-es nyalábnál az összes szint populációja gyorsan fogy, erőteljes exponenciális (logaritmus tengellyel ábrázolva lineáris) nyalábgyengülés figyelhető meg, míg 60 keV-es nyalábnál szinte konstans populációk állnak be. Ha ugyanolyan plazmaparaméterekkel különböző energiájú nyalábokra futtatunk, kevésbé szemléletesen, de szintén látszik ez a különbség.



4.2. ábra. *RENATE és az új megoldó összehasonlítása lítium nyalábok evolúciójára számolt értékekre: 100 keV-es nyaláb a 4.1 kisebb sűrűségű és hőmérsékletű plazmában (balra) és 60 keV-es nyaláb a nagyobb sűrűségű és hőmérsékletű plazmában (jobbra).*

A 4.2 ábrákon RENATE és az új megoldó által számított értékek összehasonlítása (*benchmark*) látható. A bal oldali ábra alapján kimondhatjuk, hogy a *benchmark* sikeres, az értékek közelítőleg megegyeznek. A jobb oldali ábra reprezentálja azokat az esetet, amikor valamilyen okból a két értékhez tartozó görbék észrevehetően eltérnek egymástól, ez jellemzően magas plazmahőmérséklet - alacsonyabb nyalábenergia párosításnál fordul elő.

Ha a 2s nível populációjának számbeli eltérését vizsgáljuk, az előbb bemutatott 4.2 bal oldali képhez tartozó számítási különbség 15 cm után $2 \cdot 10^{-3}$, míg a jobb oldalin csak $3 \cdot 10^{-4}$ körül adódik. Egy vagy két nível elhanyagolásával még értelmes eredményt kapunk, lítiumra a 4.2 második konfigurációra 8 szint figyelembevételével 10^{-3} nagyságrendbe esik, 7 szint esetén ennek duplája.

A megoldó rendjének változtatása és a megengedett hiba csökkentése, és a lépésköz változtatása nem befolyásol észrevehetően az eredményen.

Az új megoldó további kiegészítő funkciója, hogy megadható a hőmérséklet és a sűrűség külön elektronokra és protonokra vonatkoztatva. A sűrűség körülbelül azonos, ezért itt nem jelent gondot, ha csak egy értéket tudunk megadni, de a hőmérséklet jobban eltér részecskefajtánként. Mivel az ionok rátái kevésbé hőmérsékletfüggők, ez nem jelent nagy eltérést, ránézésre nem észrevehető, de ha számítást végzünk, 10^{-4} nagyságrendjébe eső változások tűnnek fel.

Az interpoláció típusának állítása szintén nem okoz látható változást, tehát az ebből adódó hibát is kizárhatjuk.

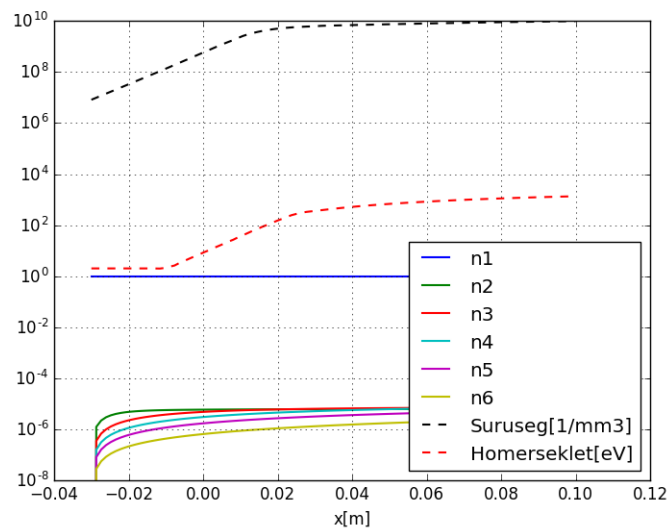
A futási idő a lépésköztől, a megoldó beállításaitól nem függ jelentősen, de

egy szint elhanyagolásával már 15%-kal rövidül.

4.2. Megoldó valós profilra

A konstans megoldó verifikációja után létrehoztam egy új modult, amelyben kibővíttem a megoldót úgy, hogy valós hőmérséklet- és sűrűségprofilra tudjon számolni. Ezek az értékek megadott pontokban ismertek, interpolálni kell őket a kívánt lépésközökre.

A *numpy* csomag több dimenziós tömbjeinek köszönhetően a feladat megoldható volt a C mátrix 3 dimenzióra történő kibővítésével, ahol az új dimenzió felel meg a távolságnak. Ebben lépésként a megfelelő ponthoz tartozó 2 dimenziós C mátrix a deriváltfüggvényen belül minden ciklusnál léptetett változó bevezetésével egyszerűen megkereshető.



4.3. ábra. A *nívók normalizált populációi, a sűrűségprofil, és a hőmérsékletprofil a nyaláb mentén.*

A realiztikus profilokra ábrázolt nyalábevolúció a 4.3 ábrán jelenik meg a hőmérséklet és sűrűségprofil feltüntetésével. A betöltöttségek alakulása jellegre hasonló a konstans profiloknál látottakhoz.

A futási idő itt a profilok betöltéséből és a mátrix harmadik dimenziójából adódóan a konstans megoldóra jellemzőhöz képest tízszeresére nő.

5. fejezet

Összefoglaló

Munkám a RENATE plazmadiagnosztika szimulációs kód újraírásának megkezdésére irányult. Ennek keretében új nyalábevolúció számító magot hoztam létre, illetve az ehhez szükséges adatokat ellenőriztem. Utóbbi feladat három részből állt össze: alapos kutatómunkát igényelt, a ráták ábrázolására alkalmas program megírását, és a kapott eredmények elemzését. A kitűzött cél, az új rátaegyenlet megoldó megírása, megvalósult, a korábbi IDL megoldóval történő *benchmark* sikeres volt. Mivel ez a megoldó más megoldókkal össze volt mérve, megbízhatónak tekinthető. Az új megoldó eredményei nem mindenhol egyeznek tökéletesen az előző eredményekkel, de ezek az eltérések nem szignifikánsak, és magyarázhatóak az eltérő numerikus implementációval.

A projekt kapcsán a RENATE szimulációs kód magja, és bemeneti adatai ellenőrzésen mentek át. Az atomfizikai folyamatok megfigyelésének eredményeképp meghatároztam, hogy mely tartományokon nem érdemes számolni, ha pontos eredményt szeretnénk kapni. Ezek a kikötések nem okoznak problémát a BES szimulációban. A 10 keV fölötti nyaláb alkalmazása valóban szükséges kikötés, hiszen ennél alacsonyabb energiájú nyalábnál nagyon hamar erőteljes a gyengülés, nem hatol be a plazmába, így nem alkalmas diagnosztikára. A 10 eV fölötti plazmahőmérsékletre való számítás is reális, hiszen egy mágneses összetartású plazma a legkülső rétegeiben is van ilyen forró, 10 eV alatt az a feltételezésünk sem lenne helyes, hogy a plazma teljesen ionizált.

A használt mennyiségek egységesen alap SI mértékegység rendszerbe lettek átváltva. A használt nyelv, és a hozzá tartozó szükséges programcsomagok mind szabadon hozzáférhetőek, a kódokban pedig a függvény- és változónevek beszédesek, így megértésük nem okoz majd nehézséget egy következő fejlesztőnek.

Kitekintés

A megoldókat a használat során felmerülő irányban fejlesztjük majd, például ki lehet egészíteni úgy, hogy tetszőleges szennyezőkre számolhassunk vele. A megoldóra, mint magra ráépülhet a RENATE továbbfejlesztett változata, amely majd tartalmazza elődjének bővített, optimalizált moduljait, illetve új funkciókat.

Megkezdődött a megoldó implementálása ez EU-IM (*European Integrated Modelling*) mágneses összetartású fúziós berendezések folyamatait modellező nemzetközi rendszerbe. Október végén definiálva lettek a kommunikációs felületek, és elfogadtatva a saját rátáink használata.

További tervek között szerepel, hogy a RENATE utódja W7-X sztellarátor Python alapú programkörnyezetébe is integrálva legyen, de egyéb nemzetközi méretű együttműködések, alkalmazások is bőven felmerülnek a szintetikus diagnosztika területén.

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni Dr. Pokol Gergőnek, hogy már elsőéves energetikai mérnökként is látta bennem a potenciált, hogy részt vehessek a fúziós kutatócsoport munkájában. Neki, és második témavezetőmnek, Asztalos Örsnek köszönöm továbbá a tanulásra és önálló gondolkodásra való ösztönzést, a sok segítséget, konzultációval töltött órákat, és a folyamatos biztatást.

Irodalomjegyzék

- [1] John Wesson - The Science of JET (*The achievements of the scientists and engineers who worked on the Joint European Torus 1973-1999*), 2000.
- [2] Francis F. Chen - Introduction to plasma physics and controlled fusion, 1984.
- [3] I.Pusztai - Fúziós berendezések atomnyaláb diagnosztikájának modellezése; *BME, MSc Diplomamunka*,2007.
- [4] Pokol Gergő, Dr. Pór Gábor, Réfy Dániel Imre - Iongyorsító Konceptió Különböző Alkalmazásokra (*Kutatási jelentés a NAP 6.4 témában 2006 során, és 2006-2008 időszakban ahhoz kapcsolódóan végzett munkáról*), BME-NTI-442/2008.
- [5] I. Pusztai, G.I. Pokol, D.I. Réfy, S. Zoletnik, D. Dunai, G. Anda, J. Schweinzer - Deconvolution-based correction of alkali beam emission spectroscopy density profile measurement, *Review of Scientific Instruments*, Vol.80: 083-502, 2009.
- [6] D. Guszejnov, G. I. Pokol, I. Pusztai, D. I. Réfy, S. Zoletnik, M. Lampert, Y. U. Nam - Three dimensional modeling of beam emission spectroscopy measurements in fusion plasmas; *Review of Scientific Instruments*, Vol.83: 113 -501, 2012.
- [7] M. Lampert, G. Anda, A. Czopf, G. Erdei, D. Guszejnov, A. Kovácsik, G.I. Pokol, D.I. Réfy, Y.U. Nam, S. Zoletnik - Combined hydrogen and lithium beam emission spectroscopy observation system for Korea Superconducting Tokamak Advanced Research; *Review of Scientific Instruments*, Vol.86: 073-501, 2015.

- [8] P. Helander, D. J. Sigmar – Collisional Transport in Magnetized Plasmas; *Cambridge University Press* ISBN 0-521-80798-0, 2002.
- [9] B.Schweer - Application of atomic beams for plasma diagnostics; *Fusion Science and Technology*, Vol.49: 404-411, 2006.
- [10] J. Schweinzer, R. Brandenburg, I. Bray, R. Hoekstra, F. Aumayr, R. K. Janev H. P. Winter – Database for Inelastic Collisions of Lithium Atoms with Electrons, Protons, and Multiply Charged Ions; *Atomic Data and Nuclear Data Tables* Vol.72: 239–273, 1999.
- [11] IAEA, ALADDIN
<http://www-amdis.iaea.org/ALADDIN/>, 2010.
- [12] ADAS Project, Open ADAS
<http://open.adas.ac.uk>, 2011.
- [13] E. Delabie, M. Brix, C. Giroud, R. J. E. Jaspers, O. Marchuk, M. G. O’Mullane, Yu. Ralchenko, E. Surrey, M. G. von Hellermann, K. D. Zastrow, and JET-EFDA Contributors, *Plasma Phys. Controlled Fusion* 52(12), 125008, 2010.
- [14] NIST Atomi Spektrum Adatbázis
<http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>
- [15] I. Bray – Convergent Close-Coupling Method for the Calculation of Electron Scattering on Hydrogenlike Targets; *Physical Review A* Vol.49 No.2. 1066-1082, 1994.
- [16] D. Wutte, R. K. Janev, F. Aumayr, M. Schneider, J. Schweinzer, J. J. Smith, H. P. Winter – Cross Sections for Collision Processes of Li Atoms Interacting with Electrons, Protons, Multiply Charged Ions, and Hydrogen Molecules; *Atomic Data and Nuclear Data Tables* Vol.65, 155-180, 1997.
- [17] G. Horvath, J. Schweinzer, HP. Winter, F. Aumayr – Na(3p2s) Excitation by Impact of Slow Multiply Charged Ions; *Physical Review A* Vol.54 No. 4., 3022-3028, 1996.
- [18] R. Brandenburg, J. Schweinzer, S. Fiedler, F. Aumayr, H.P. Winter – Modelling of fast neutral Li beams for fusion edge plasma diagnostics; *Plasma Physics and Controlled Fusion* Vol.41, 471-484, 1999.

- [19] Scipy Lecture Notes (*One document to learn numerics, science, and data with Python*)
<http://www.scipy-lectures.org/intro/scipy.html>
- [20] OECD Nuclear Energy Agency
<http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/uscd1227>