

УДК 533.95

## ДВУМЕРНАЯ ТРАНСПОРТНАЯ МОДЕЛЬ НЕЙТРАЛОВ НА ОСНОВЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПРОХОДА И УХОДА ПОТОКОВ С ГРУППАМИ ПО ЭНЕРГИЯМ

*А.А. Кожурин, Ю.М. Семенец, Р.Р. Хайрутдинов, В.Э. Лукаш**НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Важнейшим блоком любой программы для расчёта транспортных процессов в термоядерной плазме токамака является блок транспорта нейтралов. Хорошо развиты и зарекомендовали себя коды на основе метода Монте-Карло. Однако существует и упрощённая интегральная модель — модель на основе метода ТЕР (transmission-escape probability), программная реализация которой в коде GTNEUT может считать значительно быстрее. Модель описывает стационарное распределение атомарных нейтралов в токамаке в двумерном случае. В модели рассчитываются вероятности бесстолкновительного прохода (transmission) и ухода (escape) для потоков в каждой ячейке расчётной сетки, далее строится система линейных уравнений баланса потоков по всей сетке. Решение этой системы позволяет найти плотность нейтралов в каждой ячейке. В представленной статье дано описание многогруппового по энергиям приближения метода ТЕР, которое реализовано в коде TRNEUT. Внесена коррекция в модель: пересчитан вклад внешнего объёмного источника нейтралов в группах. Многогрупповая модель, дополненная транспортом молекул водорода, процессами объёмной рекомбинации и нейтрал-нейтральных столкновений, в связке с плазменной моделью может быть использована в коде для моделирования пристеночной плазмы в токамаке. Сравнением с кодом EIRENE (метод Монте-Карло) и аналитическими решениями на тестовых квадратных сетках с вариацией параметров фоновой плазмы в широких пределах проверена корректность расчёта концентраций нейтралов. Отсюда следует, что модель на основе метода ТЕР в многогрупповом и одногрупповом приближении можно использовать при решении задач, в которых важна скорость счёта.

**Ключевые слова:** транспортные процессы, нейтралы, токамак.

## TWO-DIMENSIONAL NEUTRAL TRANSPORT MODEL BASED ON TRANSMISSION AND ESCAPE PROBABILITIES WITH ENERGY GROUPS

*A.A. Kozhurin, Yu.M. Semenets, R.R. Khayrutdinov, V.E. Lukash**NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia*

The most important unit of any program for calculations of transport processes in fusion plasmas is a neutral transport unit. Codes based on the Monte Carlo method are well developed and have been proven. However, there is also a simplified integral model - a model based on the TEP (transmission-escape probability) method the software implementation of which in the GTNEUT code can calculate much faster. The model describes the stationary distribution of atomic neutrals in a tokamak in the two-dimensional case. The model calculates the probabilities of collisionless transmission and escape for fluxes in each cell of the computational grid, then the system of linear equations for the balance of fluxes over the entire grid is constructed. The solution of this system allows to find the density of neutrals in each cell. In the presented work, a description of a multigroup energy approximation of the TEP is given, which is implemented in the TRNEUT code. A correction is introduced in the model: the external volumetric source of neutrals in groups has been recalculated. The multi-group model, supplemented by transport of hydrogen molecules and the processes of volumetric recombination and neutral-neutral collisions, can be used in a code to simulate peripheral plasmas in a tokamak and to interpret the results of experiments on ITER and DEMO-FNS scale facilities. The correctness of the calculation of neutral concentrations has been verified with comparison with the EIRENE code (Monte Carlo method) and analytical solutions. Over square test grids with variations of background plasma parameters in wide ranges. It follows that the model based on the TEP method in the multi-group and single-group approximations can be used to solve problems in which the calculation speed is important.

**Key words:** transport processes, neutrals, tokamak.

DOI: 10.21517/0202-3822-2021-44-1-80-90

### ВВЕДЕНИЕ

Подпитка основной плазмы токамака частицами осуществляется через пристеночный слой (SOL) накачкой нейтрального газа либо инжекцией топливных таблеток, либо инжекцией быстрых нейтралов. Большое число нейтралов образуется в результате рекомбинации на поверхности первой стенки, этот процесс называют рециклингом. Существует режим с сильным рециклингом, когда частицы рабочего газа испытывают множество актов ионизации и последующей нейтрализации на поверхности диверторных пластин или в объёме дивертора [1]. В результате при переходе в режим с сильным рециклингом

плотность плазмы в диверторе растёт, в то время как температура вблизи приёмных пластин заметно снижается. Дальнейшее увеличение плотности плазмы может привести к переходу в режим с отрывом плазмы от приёмных пластин (detachment) [2, 3], когда поток плазмы снижается за счёт активации объёмной рекомбинации и излучения примеси [4, 5]. Этот режим рассматривается в качестве основного для работы дивертора ИТЭР. Таким образом, расчёт нейтрального компонента в плазме токамака представляет собой исключительную важность.

Длины свободного пробега нейтралов до столкновения с ионом варьируются в широких пределах и могут превышать размеры SOL, что накладывает ограничение на использование гидродинамических моделей транспорта нейтралов [6]. Нейтрал-нейтральные столкновения обычно менее существенны. Применение диффузионных моделей ещё более ограничено из-за дополнительного условия на малую неоднородность параметров газа нейтралов на расстоянии порядка длины свободного пробега.

При моделировании плазмы и нейтралов в SOL существенна двумерная аппроксимация, поскольку магнитные силовые линии снаружи сепаратрисы выходят на диверторные пластины, что приводит к неоднородности в полоидальном направлении. В этой связи модель нейтралов должна быть двумерной или даже трёхмерной. Трёхмерные транспортные модели нейтралов на основе метода Монте-Карло [7, 8] сочетают в себе высокую точность и полноту описываемых процессов, но они требуют много времени счёта, поскольку для уменьшения статистического разброса значений концентраций нейтралов требуется большое число пробных частиц. Трёхмерная модель, использующая аппарат функций Грина и итерации для решения уравнений для источников нейтралов, приведена в [9]. Модели других размерностей представлены в таблице в конце работы [10].

Модель на основе метода ТЕР (transmission-escape probability) описывает стационарное распределение атомарных нейтралов в токамаке в двумерном случае. Расчётная сетка представляет собой ячейки, построенные по точкам расчётной сетки для плазмы. Это позволяет использовать вероятности прохода (transmission) и ухода (escape) для потоков [11]. В многогрупповой модели [12] нейтралы разбиваются на группы по энергиям (переход от непрерывного набора значений к дискретному). Тогда для длины свободного пробега нейтралов имеем

$$\lambda = \frac{v_\beta}{n_e \langle \sigma v \rangle_i + n_i \langle \sigma v \rangle_{cx}}, \quad (1)$$

где  $v_\beta$  — скорость нейтралов в группе  $\beta$ ;  $\langle \sigma v \rangle_i$  и  $\langle \sigma v \rangle_{cx}$  — константы скорости ионизации и перезарядки.

В текущих версиях модели на основе метода ТЕР не реализованы транспорт молекулярного водорода и процессы объёмной рекомбинации и нейтрал-нейтральных столкновений, это планируется сделать в будущем. Процессы, связанные с молекулами, следует учесть, поскольку температура вблизи пластин может быть достаточно низка [13].

### ВЕРОЯТНОСТЬ БЕССТОЛКНОВИТЕЛЬНОГО ПРОХОДА

Отметим, что в методе ТЕР полагают, что через одну сторону идут два потока, один из которых направлен из исходной ячейки в граничную ячейку, а другой соответственно обратно. Поэтому в индексах потока зададим сторону ячейки и направление потока. Направление потока не следует понимать буквально, оно только определяет, из какой ячейки в какую идёт поток. Вычисление вероятности прохода следует проводить в трёхмерном пространстве. Предположим, что источник нейтралов равномерно распределён по входной поверхности ячейки под номером 1 (рис. 1), а распределение по углам косинусное, что следует из предположения об изотропности плотности входящего потока.

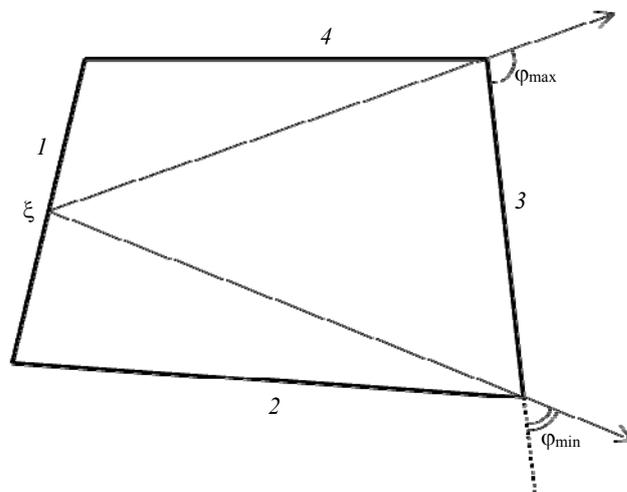


Рис. 1. Пример нумерации сторон ячейки и углы, необходимые для расчёта вероятности прохода

Тогда доля частиц в единицу времени, которая проходит ячейку от стороны 1 до стороны 3 без столкновений, или вероятность бесстолкновительного прохода  $T_{1-3}$  [13], будет равна

$$T_{1-3} = \frac{J_{3, \text{out}}}{J_{1, \text{in}}} = \int_0^{L_\xi} \frac{d\xi}{L_\xi} \frac{2}{\pi} \int_{\varphi_{\min}(\xi)}^{\varphi_{\max}(\xi)} \sin(\varphi + \varphi_{i0}) K_1 \left( \frac{L_\perp(\xi)}{\lambda \sin \varphi} \right) d\varphi, \quad (2)$$

где  $L_\xi$  — длина стороны 1;  $\varphi_{\max}(\xi)$  и  $\varphi_{\min}(\xi)$  — углы между стороной 3 и направляющей, проведённой из точки на стороне 1 к крайним точкам стороны 3;  $\varphi_{i0}$  — угол между нормальными к сторонам 1 и 3;  $K_1$  — функция Бикли 3-го порядка;  $L_\perp(\xi)$  — длина перпендикуляра к стороне 3, проведённого из точки на стороне 1.

### СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ДЛЯ СВЯЗИ ПОТОКОВ

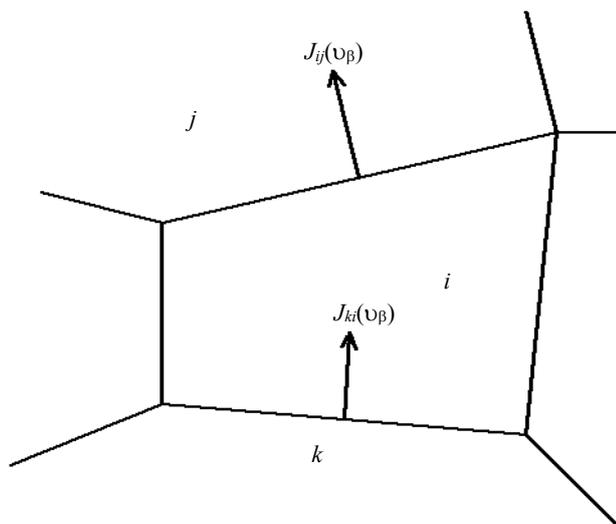


Рис. 2. Обозначение потоков нейтралов между ячейками

Повторим рассуждения в соответствии с [12]. Поток в группе  $\beta$  по скоростям из ячейки  $k$  в ячейку  $i$  обозначим  $J_{ki}(v_\beta)$  (рис. 2). Величины, зависящие от  $\lambda$ , также зависят от  $v_\beta$ . Группа  $\beta$  образуется частицами в интервале скоростей  $(v_{\beta, \min}, v_{\beta, \max})$ , среднее от них принимают за скорость  $v_\beta$ . Для последнего интервала полагают приблизительно  $v_\beta = 1,2v_{\beta, \min}$ , соотношение получается усреднением по максвелловскому распределению с некоторой характерной для SOL температурой.

Вероятность прохода частицы без столкновений из ячейки  $k$  через ячейку  $i$  в ячейку  $j$  равна  $T_i^{kj}$ . Бесстолкновительная часть потока группы  $\beta$  из ячейки  $i$  в ячейку  $j$  равна

$$\sum_k J_{ki}(v_\beta) T_i^{kj}(v_\beta). \quad (3)$$

Число столкновений в единицу времени в группе  $\beta$  равно  $\sum_k J_{ki}(v_\beta) (1 - \sum_j T_i^{kj}(v_\beta))$ . Суммарное количество вторичных нейтралов от одного столкновения

$$S_{i1} = \sum_\gamma c_i(v_\gamma) \sum_k J_{ki}(v_\gamma) \left( 1 - \sum_j T_i^{kj}(v_\gamma) \right), \quad (4)$$

где  $c_i(v_\gamma)$  — вероятность перезарядки:

$$c_i(v_\gamma) = \frac{n_i \langle \sigma v \rangle_{cx}}{n_e \langle \sigma v \rangle_i + n_i \langle \sigma v \rangle_{cx}}. \quad (5)$$

Источник частиц группы  $\beta$  после одного столкновения  $d_{i\beta} S_{i1}$ , где  $d_{i\beta}$  — вероятность того, что ион после перезарядки окажется в группе  $\beta$ :

$$d_{i\beta} = \operatorname{erf} \left( \frac{v_{\beta, \max}}{\sqrt{2kT/m}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{v_{\beta, \min}}{\sqrt{2kT/m}} \right) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{v_{\beta, \max}}{\sqrt{2kT/m}} \exp \left( -\frac{mv_{\beta, \max}^2}{2kT} \right) - \frac{v_{\beta, \min}}{\sqrt{2kT/m}} \exp \left( -\frac{mv_{\beta, \min}^2}{2kT} \right) \right). \quad (6)$$

Данное выражение получается, если проинтегрировать максвелловское распределение по отрезку  $[v_{\beta, \min}, v_{\beta, \max}]$ . Поток в ячейку  $j$  частиц группы  $\beta$ , образованных при одном столкновении, равен  $d_{i\beta} S_{i1} P_{0i\beta} \Lambda_{ij}$ , где  $P_{0i\beta}$  — вероятность ухода [14] без столкновения частицы в группе  $\beta$ ;  $\Lambda_{ij}$  — вероятность того, что уходящая частица перейдёт в ячейку  $j$ . Здесь

$$P_{0i\beta} = \frac{1}{1 + \frac{4S_i}{\lambda_i(v_\beta)L_i}} ;$$

$$\Lambda_{ij} = \frac{L_{ij}}{L_i} , \quad (7)$$

где  $S_i$  — площадь ячейки;  $L_i$  — периметр ячейки;  $L_{ij}$  — длина стороны между ячейками  $i$  и  $j$ .

Число частиц группы  $\beta$ , испытывающих второе столкновение, в единицу времени равно  $d_{i\beta}S_{i1}(1 - P_{0i\beta})$ . Суммарное число нейтралов, образованных после второго столкновения:  $S_{i1} \sum_{\gamma} d_{i\gamma}(1 - P_{0i\gamma})c_i(v_\gamma)$ . Из них

в группе  $\beta$ :  $d_{i\beta}S_{i1} \sum_{\gamma} d_{i\gamma}(1 - P_{0i\gamma})c_i(v_\gamma)$ . Поток в ячейку  $j$  частиц группы  $\beta$ , образованных при втором

столкновении, равен  $d_{i\beta}S_{i1}P_{0i\beta}\Lambda_{ij} \sum_{\gamma} d_{i\gamma}(1 - P_{0i\gamma})c_i(v_\gamma)$ .

Выражения для последующих столкновений получаются аналогично. Суммируя их, получаем поток

группы  $\beta$  в ячейку  $j$  после всех столкновений:  $\frac{d_{i\beta}S_{i1}P_{0i\beta}\Lambda_{ij}}{1 - \sum_{\gamma} d_{i\gamma}(1 - P_{0i\gamma})c_i(v_\gamma)}$ . Обозначим

$$P_{i\beta} = \frac{P_{0i\beta}}{1 - \sum_{\gamma} d_{i\gamma}(1 - P_{0i\gamma})c_i(v_\gamma)} . \quad (8)$$

Тогда выражение принимает простой вид

$$d_{i\beta}S_{i1}P_{i\beta}\Lambda_{ij} . \quad (9)$$

Существует ещё внешний источник нейтралов группы  $\beta$  (инжекция таблеток, рекомбинация). Выражение для источника в группах было скорректировано по сравнению с [12]. Обозначим его  $S_{\text{ext}}(v_\beta)$ , где индекс  $i$  опущен. Количество частиц из внешнего источника группы  $\beta$ , которые не испытают столкновений, равно  $S_{\text{ext}}(v_\beta)P_{0i\beta}$ . Число частиц группы  $\beta$ , испытавших столкновение,  $S_{\text{ext}}(v_\beta)(1 - P_{0i\beta})$ . Суммарное количество нейтралов после одного столкновения обозначим

$$S_{i1(\text{ext})} = \sum_{\gamma} S_{\text{ext}}(v_\gamma)(1 - P_{0i\gamma})c_i(v_\gamma) . \quad (10)$$

Можно заметить, что  $S_{i1(\text{ext})}$  есть некоторый эквивалент величины  $S_{i1}$ , только для внешнего источника. Тогда, повторив те же выкладки, получим в итоге поток частиц группы  $\beta$  в ячейку  $j$  от внешнего источника:

$$S_{\text{ext}}(v_\beta)P_{0i\beta}\Lambda_{ij} + d_{i\beta}S_{i1(\text{ext})}P_{i\beta}\Lambda_{ij} . \quad (11)$$

Запишем полный поток группы  $\beta$  из ячейки  $i$  в ячейку  $j$ , просуммировав (3), (9) и (11):

$$J_{ij}(v_\beta) = \sum_k J_{ki}(v_\beta)T_i^{kj}(v_\beta) + d_{i\beta}S_{i1}P_{i\beta}\Lambda_{ij} + S_{\text{ext}}(v_\beta)P_{0i\beta}\Lambda_{ij} + d_{i\beta}S_{i1(\text{ext})}P_{i\beta}\Lambda_{ij} . \quad (12)$$

Можно воспользоваться методом последовательных приближений, чтобы посчитать  $S_{i1}$ , тогда уравнения для групп расцепляются и в каждой группе имеем замкнутую систему линейных уравнений, решая которую, находим потоки в группе. Оказывается, в случае больших неоднородностей по температуре требуется много итераций при расчёте  $S_{i1}$ . В этом случае эффективнее будет решать полную систему с зацепленными группами. Стационарное уравнение баланса частиц в группе  $\beta$  в ячейке  $i$  имеет вид

$$\sum_k (J_{ki}(v_\beta) - J_{ik}(v_\beta)) = -N_{\beta i}(n_e < \sigma v >_i + n_i < \sigma v >_{\text{cx}, \beta}) + d_{i\beta} \sum_{\gamma} N_{\gamma i} n_i < \sigma v >_{\text{cx}, \gamma} . \quad (13)$$

Записывая соотношения для всех групп и решая получившуюся линейную систему, получим значения концентраций нейтралов  $N_{\beta i}$  в ячейке  $i$  в группах  $\beta$ . Также можно просуммировать потоки по группам и решать более простое уравнение, чтобы найти суммарную по группам концентрацию.

Рассмотрим границы применимости некоторых из перечисленных выражений. Если  $\Delta x$  — характерный размер ячейки, предположение изотропности плотности потока при расчёте вероятности прохода неуместно при  $\Delta x/\lambda \ll 1$ , предположение однородности источника по ячейке при расчёте вероятности ухода неуместно при  $\Delta x/\lambda \gg 1$ , точность выражения  $\Lambda_{ij}$  также снижается при росте отношения  $\Delta x/\lambda$  [15]. Следовательно, размер ячеек должен быть порядка длины свободного пробега.

### РАСЧЁТ МАКСВЕЛЛОВСКОГО ПОТОКА НА ГРАНИЦЕ СО СТЕНКОЙ

Рассчитаем максвелловский поток нейтралов группы  $\beta$  со стенки с температурой стенки за счёт газонапуска. Поток в группе  $\beta$  определяется выражением

$$G_{\beta} = n \int_{D_{\beta}} v_y f(v) dv = n \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \iiint_{D_{\beta}} v \sin \theta \sin \phi \exp \left( -\frac{mv^2}{2kT} \right) v^2 dv \sin \theta d\theta d\phi, \quad (14)$$

где для области интегрирования  $D_{\beta}$  принято  $v_{\beta, \min} < v < v_{\beta, \max}$ ,  $0 < \theta < \pi$ ,  $0 < \phi < \pi$ . Интегрирование по углам даёт  $\pi$ . Выполнив интегрирование по модулю скорости, получим

$$G_{\beta} = mv_0 \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left\{ \exp \left( -\frac{v_{\beta, \min}^2}{v_0^2} \right) \left( 1 + \frac{v_{\beta, \min}^2}{v_0^2} \right) - \exp \left( -\frac{v_{\beta, \max}^2}{v_0^2} \right) \left( 1 + \frac{v_{\beta, \max}^2}{v_0^2} \right) \right\}, \quad v_0 = \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (15)$$

Полный поток получается интегрированием по  $0 < v < +\infty$  и равен  $G = mv_0 \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$ . Тогда

$$G_{\beta} = G \left\{ \exp \left( -\frac{v_{\beta, \min}^2}{v_0^2} \right) \left( 1 + \frac{v_{\beta, \min}^2}{v_0^2} \right) - \exp \left( -\frac{v_{\beta, \max}^2}{v_0^2} \right) \left( 1 + \frac{v_{\beta, \max}^2}{v_0^2} \right) \right\}. \quad (16)$$

### СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЁТА МЕТОДОВ ТЕР-MG, ТЕР-1G И МОНТЕ-КАРЛО

Многогрупповой по энергиям метод ТЕР или ТЕР-MG (multigroup) реализован в коде TRNEUT [12]. Далее расчёты по методу Монте-Карло выполнены с помощью кода Eirene [17], объёмная рекомбинация и нейтрал-нейтральные столкновения были отключены, учитывались только ионизация электронным ударом из основного состояния и перезарядка, возбуждённые состояния не учитывались, поступательное движение фоновой плазмы в следующих опытах отсутствует. Константы скорости процессов в GTNEUT и TRNEUT опираются на [18, 19], последняя ревизия была проведена Houlberg W.A. и Attenberger S.E. в 1988 г. В TRNEUT используются 20 групп, первые 19 из которых покрывают диапазон от 0 до 79 эВ. Число пробных частиц для метода Монте-Карло установим на уровне  $10^4$ , максимальное число событий  $2 \cdot 10^5$ . Также сравним с тем, что

даёт одnogрупповое приближение метода ТЕР или ТЕР-1G, в котором энергия нейтралов в ячейке полагается равной температуре ионов.

На рис. 3 показана геометрия задачи первой серии расчётов. Стрелками показан напуск атомарного дейтерия ( $10^{19}$  частиц в секунду) в 6-ю ячейку со скоростями, распределёнными по Максвеллу с температурой 50 эВ. Угловое распределение косинусное. Стенки полностью и зеркально отражают поток нейтралов. Ограничимся пока однородной (по ячейкам) дейтериевой плазмой. Далее, если не оговорено иное, температура плазмы 50 эВ. При этом температура и плотность ионов равны температуре и плотности электронов. В следующих двух предельных случаях проведём сравнение ещё с аналитическими расчётами, предварительно их обосновав.

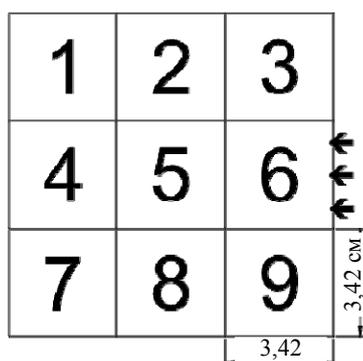


Рис. 3. Схема задачи

Установим концентрацию плазмы на уровне  $10^{16} \text{ м}^{-3}$ , тогда средняя длина свободного пробега нейтралов на три порядка превышает размеры системы. В предположении, что стенки полностью отражают поток нейтралов, соблюдается следующий интегральный баланс: количество инжектируемых нейтралов равно количеству ионизирующихся электронным ударом в единицу времени во всём объёме. Из стационарного уравнения баланса нейтралов вычислим концентрацию нейтралов. Следует отметить, что за основу аналитических расчётов взято значение константы скорости ионизации из базы данных кода GTNEUT.

В табл. 1 приведены результаты расчётов, представляющие собой концентрации нейтралов в одной из ячеек. Распределение нейтралов по ячейкам практически однородно.

Т а б л и ц а 1. Концентрации нейтралов по всем ячейкам в случае больших длин свободного пробега нейтралов по сравнению с характерным размером ячеек

| Количество частиц           | Аналитический расчёт | Монте-Карло | ТЕР-MG | ТЕР-1G |
|-----------------------------|----------------------|-------------|--------|--------|
| $N, 10^{18} \text{ м}^{-3}$ | 3,5                  | 3,4         | 3,5    | 3,5    |

Для концентрации плазмы, равной  $10^{22} \text{ м}^{-3}$ , средняя длина свободного пробега нейтралов на два порядка меньше размера ячеек, следовательно, практически все нейтралы ионизируются у стенки в 6-й ячейке. Количество инжектируемых нейтралов равно количеству ионизирующихся электронным ударом в единицу времени в объёме 6-й ячейки в предположении полностью отражающих поток нейтралов стенок. Из стационарного уравнения баланса нейтралов вычислим концентрацию нейтралов в ячейке.

В табл. 2 приведены результаты расчётов концентрации нейтралов в 6-й ячейке. Видим хорошее соответствие результатов по методу ТЕР и Монте-Карло, а также с аналитическими расчётами.

Т а б л и ц а 2. Концентрации нейтралов в 6-й ячейке в случае малых длин свободного пробега нейтралов по сравнению с характерным размером ячеек

| Количество частиц           | Аналитические расчёты | Монте-Карло | ТЕР-MG | ТЕР-1G |
|-----------------------------|-----------------------|-------------|--------|--------|
| $N, 10^{13} \text{ м}^{-3}$ | 3,1                   | 3,1         | 3,1    | 3,1    |

Теперь сравним методы Монте-Карло и ТЕР-MG в вариантах с промежуточными длинами свободного пробега. Для оценки относительного отклонения результата расчёта методом ТЕР от результата расчёта методом Монте-Карло примем  $\delta N = \frac{|N_{\text{ТЕР}} - N_{\text{MC}}|}{N_{\text{MC}}} 100\%$ .

На рис. 4 показаны зависимости относительного отклонения суммарного числа нейтралов во всём объёме  $\delta N_{\text{сум}}$  и максимального относительного отклонения концентраций нейтралов  $\delta N_{\text{макс}}$  для многогруппового приближения ТЕР в зависимости от концентрации плазмы  $n_e$ . Видно, что по полному числу нейтралов различие незначительное (см. рис. 4, а). Однако неограниченно растёт  $\delta N_{\text{макс}}$ , например, в 5-й

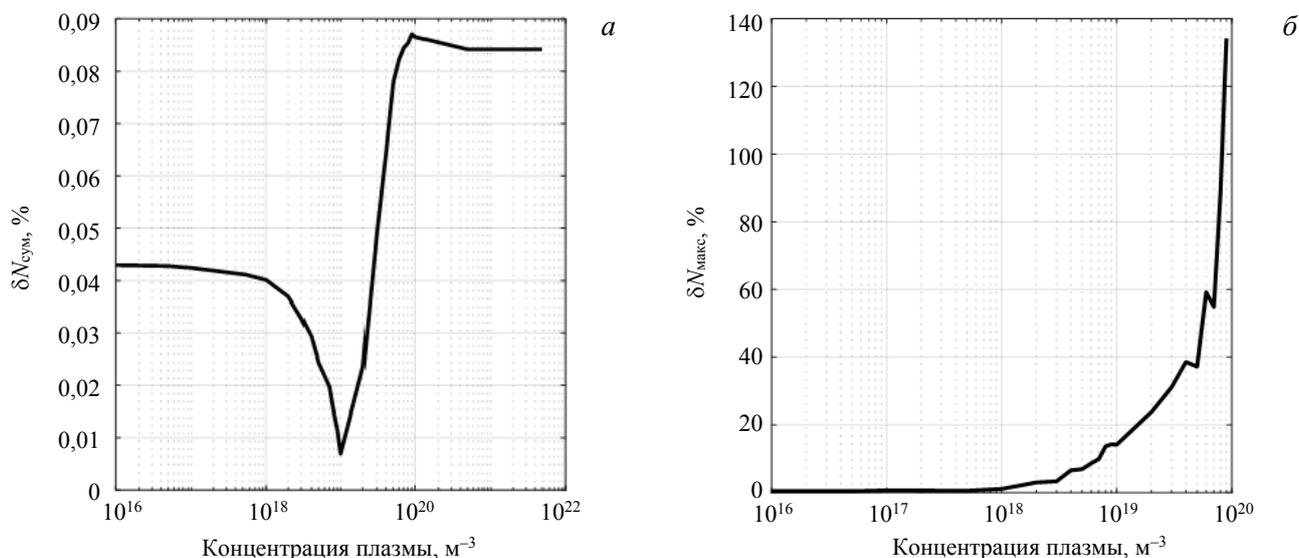


Рис. 4. Зависимость относительного отклонения суммарного числа нейтралов (а) и максимального относительного отклонения концентраций нейтралов (б) от концентрации плазмы

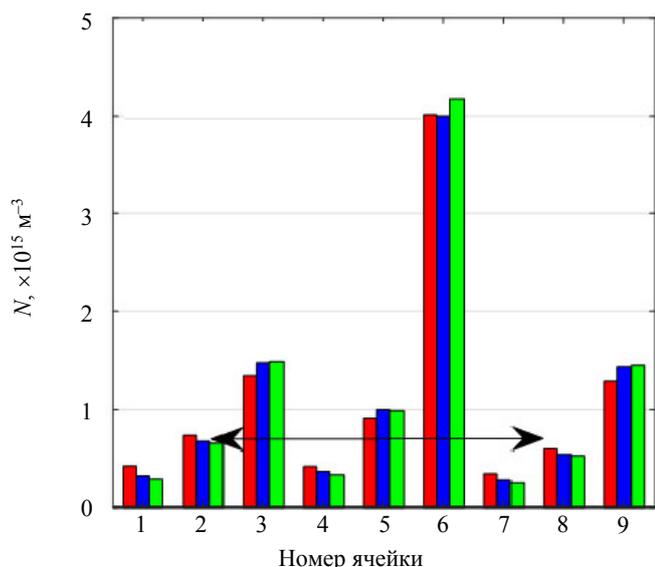


Рис. 5. Концентрация в ячейках, рассчитанная по трём методам, стрелка показывает отличие концентраций во 2-й и 8-й ячейках: ■ — Монте-Карло; ■ — TEP-MG; ■ — TEP-1G

ячейке концентрация по результатам Монте-Карло обращается в ноль при высоких  $n_e$ , поскольку методу не хватает статистики, повышение количества пробных частиц позволяет учесть нейтралы в хвосте максвелловского распределения, которые могут проникать вглубь плотной плазмы. Графики для одногруппового приближения TEP идентичны многогрупповому.

Зададим дополнительно полное поглощение (откачку) нейтралов на нижней стороне 8-й ячейки (на стенке) и однородное распределение концентрации плазмы  $3 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ . Длина свободного пробега будет порядка размера ячейки. На диаграмме концентраций нейтралов (рис. 5) видим, что в 8-й ячейке концентрация ниже, чем во 2-й. Относительные отклонения результатов представлены в табл. 3.

Далее рассмотрим случаи с инжекцией моноэнергетических нейтралов без поглощения на

Т а б л и ц а 3. Относительное отклонение для методов TEP в многогрупповом и одногрупповом приближениях в случае поглощения на стенке

| Относительное отклонение    | TEP-MG | TEP-1G |
|-----------------------------|--------|--------|
| $\delta N_{\text{sum}}, \%$ | 0,38   | 0,85   |
| $\delta N_{\text{max}}, \%$ | 24     | 32     |

стенке энергией 2 и 50 эВ, температура плазмы по ячейкам 10 эВ и концентрация плазмы  $3 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ . Результаты расчётов показаны на рис. 6 и приведены в табл. 4. Для этих случаев результаты расчётов TEP-1G несколько хуже согласуются с Монте-Карло, поскольку в одногрупповом методе нельзя правильно учесть первичные нейтралы, энергия которых отличается от температуры ионов в ячейке. Отсюда инжекция быстрых нейтралов может быть корректно учтена в многогрупповом методе.

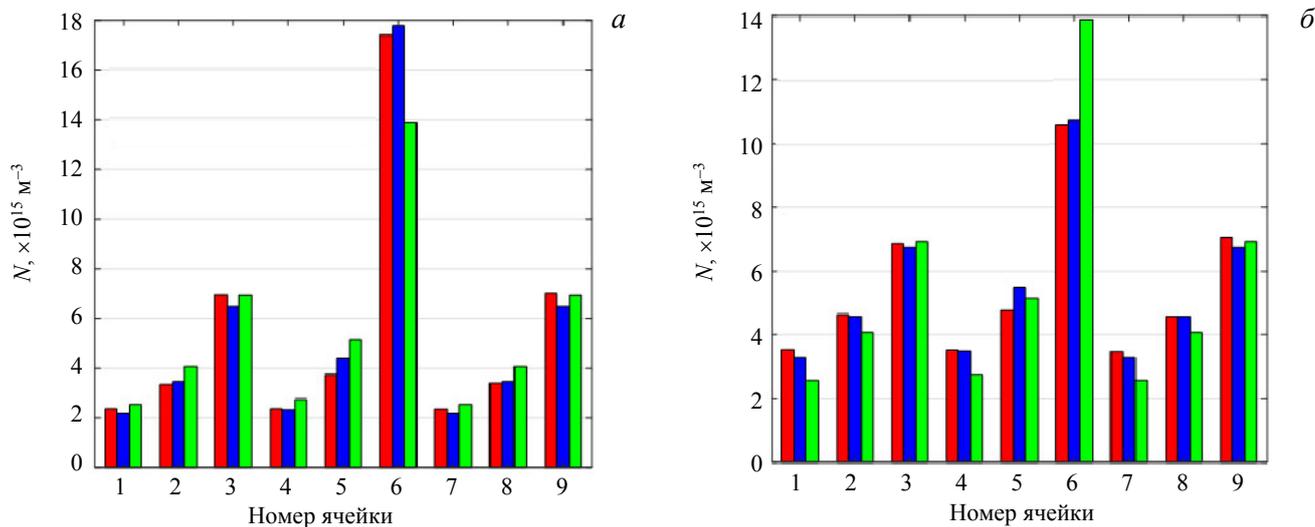


Рис. 6. Концентрации в ячейках, рассчитанные по трём методам с инжекцией нейтралов энергией 2 (а) и 50 эВ (б): ■ — Монте-Карло; ■ — TEP-MG; ■ — TEP-1G

Т а б л и ц а 4. Относительное отклонение для методов TEP в многогрупповом и одногрупповом приближениях при инжекции нейтралов энергией 2 и 50 эВ

| Относительное отклонение    | $E_0 = 2 \text{ эВ}$ |        | $E_0 = 50 \text{ эВ}$ |        |
|-----------------------------|----------------------|--------|-----------------------|--------|
|                             | TEP-MG               | TEP-1G | TEP-MG                | TEP-1G |
| $\delta N_{\text{sum}}, \%$ | 0,25                 | 0,25   | 0,23                  | 0,23   |
| $\delta N_{\text{max}}, \%$ | 18                   | 37     | 15                    | 31     |

Поскольку в рассмотренных случаях плазма однородная, то источники частиц плазмы за счёт ионизации нейтралов  $Z = Nn_e \langle \sigma v \rangle_i$  относятся как концентрация нейтралов, поэтому показательно будет отношение максимальной по модулю разности концентрации к максимальной концентрации нейтралов, т.е. сначала ищется ячейка с максимальным значением разности концентраций, потом ищется ячейка с максимальным значением концентрации, и берётся их отношение. Эта величина мала для всех предыдущих случаев, кроме ТЕР-1G в случае инжекции с энергией, отличной от температуры ячейки:  $\frac{\max |N_{\text{ТЕР}} - N_{\text{MC}}|}{\max(N_{\text{MC}})} \ll 1$ , и мало  $\delta N_{\text{sum}}$ .

Рассмотрим далее практически интересные случаи неоднородной плазмы. Граничные условия как в первом варианте задачи (см. рис. 3), только теперь напуск нейтралов будет иметь распределение по скоростям с температурой 2 эВ, в 5-й ячейке температура плазмы равна 50 эВ, в остальных 2 эВ. Однородное распределение по плотности фоновой плазмы  $3 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ . Результаты расчётов показаны на рис. 7 и приведены в табл. 5.

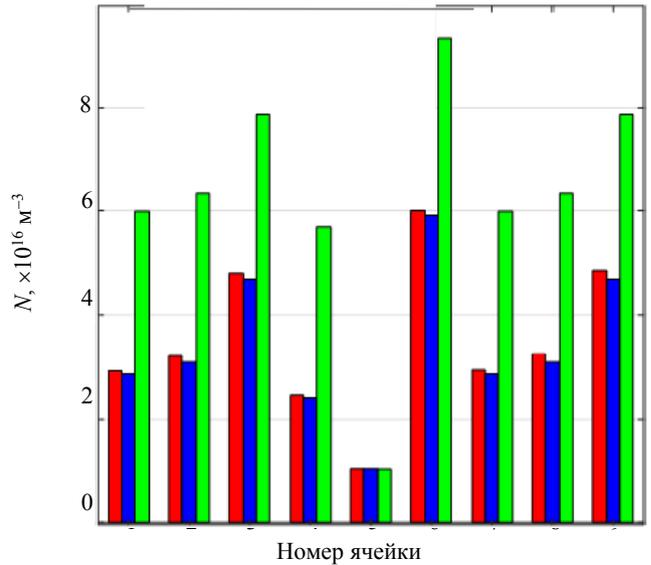


Рис. 7. Концентрации в ячейках, рассчитанные по трём методам: ■ — Монте-Карло; ■ — ТЕР-MG; ■ — ТЕР-1G

Т а б л и ц а 5. Относительное отклонение для методов ТЕР в многогрупповом и одногрупповом приближениях в случае неоднородности по температуре

| Относительное отклонение    | ТЕР-MG | ТЕР-1G |
|-----------------------------|--------|--------|
| $\delta N_{\text{sum}}, \%$ | 2,9    | 79     |
| $\delta N_{\text{max}}, \%$ | 5      | 131    |

Результаты расчёта ТЕР-1G существенно расходятся с Монте-Карло, однако с более плавным изменением температуры в расчётах на сетке размером 9 на 9 отклонение для одногруппового метода ТЕР составило  $\delta N_{\text{sum}} = 30\%$  и  $\delta N_{\text{max}} = 156\%$ . Отклонение по общему числу частиц при увеличении размерности сетки уменьшается. Также при снижении градиента температуры  $\nabla T$  уменьшаются  $\delta N_{\text{sum}}$  и  $\delta N_{\text{max}}$ .

Зададим во всех ячейках температуру плазмы 50 эВ, максвелловское распределение инжектируемых нейтралов с температурой 50 эВ и неоднородное распределение по плотности  $10^{20} \text{ м}^{-3}$  в 5-й ячейке,  $10^{19} \text{ м}^{-3}$  в остальных. Результаты расчётов показаны на рис. 8 и представлены в табл. 6.

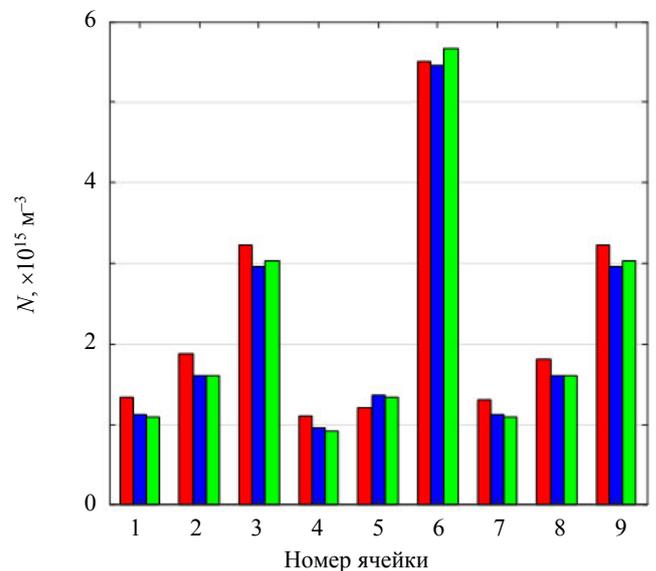


Рис. 8. Концентрации в ячейках, рассчитанные по трём методам: ■ — Монте-Карло; ■ — ТЕР-MG; ■ — ТЕР-1G

Т а б л и ц а 6. Относительное отклонение для методов ТЕР в многогрупповом и одногрупповом приближениях в случае неоднородности по концентрации

| Относительное отклонение    | ТЕР-MG | ТЕР-1G |
|-----------------------------|--------|--------|
| $\delta N_{\text{sum}}, \%$ | 7      | 6      |
| $\delta N_{\text{max}}, \%$ | 15     | 17     |

В случае неоднородной плазмы отношение максимальной по модулю разности источников частиц плазмы за счёт ионизации нейтралов к максимальной величине источника, т.е. сначала ищется ячейка с

максимальным значением разности источников частиц плазмы, потом ищется ячейка с максимальным значением источника и берётся их отношение, не превышает  $\delta N_{\max}$ :  $\frac{\max |Z_{\text{TEP}} - Z_{\text{MC}}|}{\max (Z_{\text{MC}})} \leq \delta N_{\max}$ , а также

мало  $\delta N_{\text{sum}}$ , что также верно для TEP-1G в случае плавной неоднородности по температуре как при переходе от ячейки к ячейке, так и при малости градиента  $\nabla T$ . Ограничения на величину градиента температуры для корректности расчётов по одnogрупповому методу в данной работе не исследуются.

Рассмотрим более сложную задачу. Размерность сетки 39 на 39, размер ячейки прежний 3,42 см. Зададим температуру плазмы, плавно изменяющуюся в пределах от 2 до 100 эВ, её распределение показано на рис. 9, а. Распределение плотности плазмы (см. рис. 9, б) зададим таким, чтобы давление плазмы было постоянно и равнялось 10 Па. На нижней стенке имеет место полное поглощение нейтралов, остальные стенки полностью отражают поток нейтралов. Источник нейтралов равномерно распределён по левой и правой стенкам и равен  $10^{19}$  частиц в секунду. В качестве канонического распределения нейтралов примем результаты расчёта методом Монте-Карло с  $1,8 \cdot 10^6$  пробными частицами (рис. 10 а). Время такого расчёта составило 180 с на одном ядре с частотой 2,83 ГГц. Важно посмотреть, что даёт метод Монте-Карло при времени счёта, сравнимом с одnogрупповым приближением TEP (см. рис. 10, б), для расчёта которого было выставлено  $10^4$  пробных частиц. Распределения нейтралов, рассчитанные методами TEP-1G и TEP-MG, показаны на рис. 11. Время счёта и относительные отклонения представлены в табл. 7, в которой также показаны результаты для метода Монте-Карло с  $1,2 \cdot 10^5$  пробных частиц. При определении времени счёта методом TEP пренебрегалось временем решения системы линейных уравнений для потоков, поскольку они решаются итерационно, а в качестве первого приближения можно взять значения с предыдущего шага по времени, что будет возможно реализовать в согласованном коде, считающем транспорт нейтралов и плазмы.

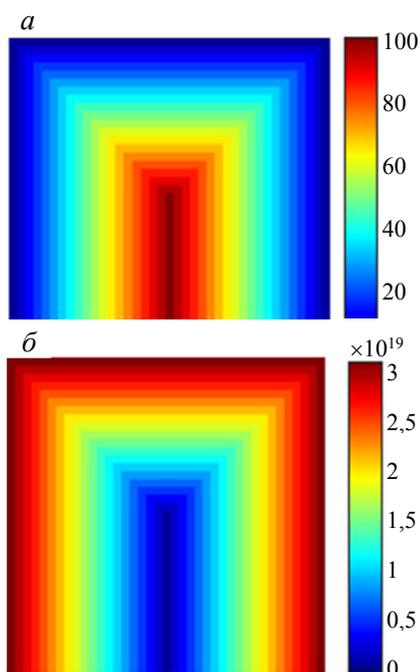


Рис. 9. Распределение температур (эВ) (а) и плотности плазмы ( $\text{m}^{-3}$ ) (б). Линеиный масштаб цвета

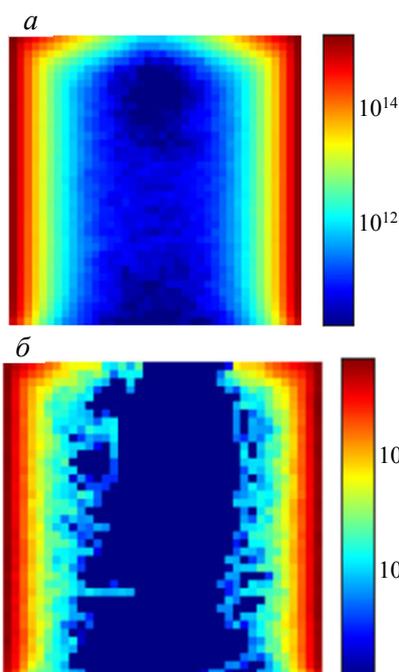


Рис. 10. Концентрации ( $\text{m}^{-3}$ ), рассчитанные методом Монте-Карло с  $1,8 \cdot 10^6$  (а) и  $10^4$  (б) пробных частиц. Логарифмический масштаб цвета

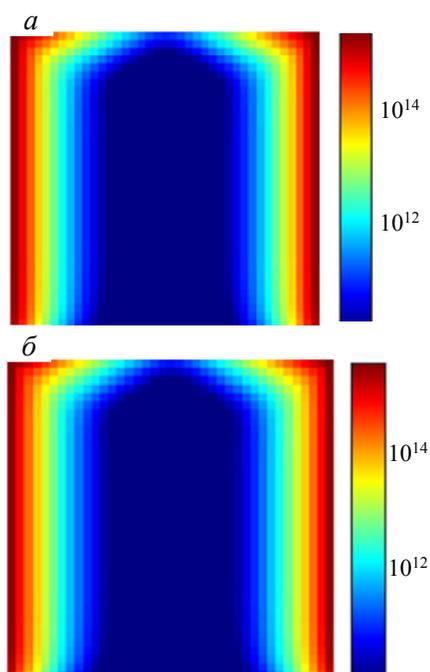


Рис. 11. Концентрации ( $\text{m}^{-3}$ ), рассчитанные методом TEP в многогрупповом (а) и одnogрупповом (б) приближениях. Логарифмический масштаб цвета

Т а б л и ц а 7. Относительное отклонение от метода Монте-Карло с  $1,8 \cdot 10^6$  пробными частицами для методов Монте-Карло с  $1,2 \cdot 10^5$  и  $10^4$  пробными частицами, TEP в многогрупповом, одnogрупповом и двухгрупповом приближениях в случае неоднородной плазмы на сетке размером 39 на 39 и соответствующие времена счёта

| Относительное отклонение    | Монте-Карло, $1,2 \cdot 10^5$ | Монте-Карло, $10^4$ | TEP-MG | TEP-1G | TEP-2G |
|-----------------------------|-------------------------------|---------------------|--------|--------|--------|
| $\delta N_{\text{sum}}, \%$ | 0,3                           | 1                   | 6      | 14     | 8      |
| $\delta N_{\text{max}}, \%$ | 422                           | 2279                | 98     | 98     | 97     |
| $t, \text{c}$               | 11,9                          | 1,1                 | 12,5   | 0,8    | 1,7    |

Значения  $\delta N_{\text{sum}}$  малы, а значения  $\delta N_{\text{max}}$  велики, однако последнее не является достаточным условием некорректности расчётов даже в случае с методом Монте-Карло с  $10^4$  пробными частицами, поскольку даже небольшое отклонение по числу нейтралов в объёме с маленькой концентрацией существенно в пределах всей ячейки, но в масштабах всей задачи перераспределение может быть несущественно. Стоит отметить, что количество ячеек с значениями относительного отклонения выше, чем 98%, для метода Монте-Карло с  $10^4$  пробными частицами составило больше половины от общего числа ячеек, большая часть которых находится в области более горячей плазмы, где также заметен шум. Метод TEP-1G с тем же временем счёта в этой области работает лучше. С точки зрения величины  $\delta N_{\text{max}}$  метод TEP-MG даёт несколько лучший результат, чем метод Монте-Карло с  $1,2 \cdot 10^5$  пробными частицами с тем же временем счёта, но, что важно, значения относительного отклонения выше 98% наблюдаются только в 14% ячеек. Значения  $\delta N_{\text{sum}}$  для метода Монте-Карло меньше, однако требуется решать согласованную задачу нейтралы—плазма, чтобы определить, какой метод лучше поддерживает число частиц постоянным в стационарном режиме. Были также выполнены расчёты по двухгрупповому методу (см. табл. 7), который отличается как от одногруппового, так и от многогруппового метода, средняя энергия в группе определяется из максвелловского распределения в отличие от многогруппового метода. Как видно из табл. 7, двухгрупповой метод приближается по точности к многогрупповому, отметим, что на сетке 3 на 3 с неоднородностью по температуре  $\delta N_{\text{max}} = 10\%$ , что существенно ниже, чем при расчётах по одногрупповому методу. Двухгрупповой метод подробно в этой статье не освещается.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлено описание многогруппового варианта расчёта транспорта нейтралов в термоядерной плазме с помощью метода TEP, пересчитан вклад внешнего объёмного источника нейтралов в группах. Проведено сравнение результатов расчётов по методу TEP в многогрупповом (код TRNEUT) и одногрупповом (код GTNEUT) приближениях с результатами расчётов с использованием метода Монте-Карло (код EIRENE). Значение относительного отклонения суммарного числа нейтралов во всём объёме  $\delta N_{\text{sum}}$  для всех приближений TEP не превышает 15% в рассмотренных задачах, за исключением одногруппового приближения с большой неоднородностью по температуре. Значения максимального отклонения концентраций  $\delta N_{\text{max}}$  в задачах с сеткой 3 на 3 не превышали 31% для одногруппового метода TEP (в случае малого отклонения энергии инжектируемых моноэнергетических нейтралов от температуры ионов или напуска с максвелловским распределением с температурой, близкой к температуре ионов, при плавном изменении температуры изотермической плазмы при переходе от ячейки к ячейке и при малости градиента этой температуры) и 33% для многогруппового метода TEP. Значения  $\delta N_{\text{max}}$  в задаче с сеткой 39 на 39 составили 98% для обоих методов и были ниже, чем при расчётах методом Монте-Карло с теми же скоростями счёта. Основное отличие результатов расчётов методами TEP в сравнении с методом Монте-Карло наблюдалось в ячейках с малой концентрацией, и в целом перераспределение нейтралов и источников частиц плазмы за счёт ионизации в масштабах всей задачи было несущественно. Время расчёта на одном ядре с частотой 2,83 ГГц для одногруппового метода TEP на сетке 39 на 39 составляет 0,8 с. С увеличенным в 2 раза временем счёта двухгрупповой метод приближается по точности к многогрупповому. Из изложенного следует, что одногрупповой и двухгрупповой методы можно использовать в серии отладочных расчётов. Для более точных расчётов предполагается использовать многогрупповой метод TEP.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт».

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Lackner K. et al.** Control of particle and energy transport across the boundary of a Tokamak plasma. — Plasma Phys. Control. Fusion, 1984, vol. 26, № 1A, p. 105—115.
2. **Matthews G.F.** Plasma detachment from divertor targets and limiters. — J. of Nuclear Materials, 1995, vol. 220, p. 104—116.
3. **Loarte A. et al.** Plasma detachment in JET Mark I divertor experiments. — Nucl. Fusion, 1998, vol. 38, № 3, p. 331—371.

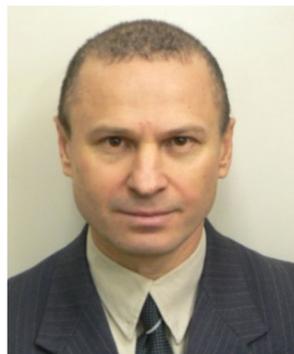
4. **Kukushkin A.S., Pacher H.D., Pitts R.A.** Characteristics of divertor detachment for ITER conditions. — *J. Nucl. Mater.*, 2015, vol. 463, p. 586—590.
5. **Krashennikov S.I., Kukushkin A.S., Pshenov A.A.** Divertor plasma detachment. — *Physics of Plasmas*, 2016, vol. 23, № 5, p. 055602.
6. **Knoll D.A. et al.** Simulation of dense recombining divertor plasmas with a Navier—Stokes neutral transport model. — *Physics of Plasmas*, 1996, vol. 3, № 1, p. 293—303.
7. **Stotler D., Karney C.** Neutral gas transport modeling with DEGAS 2. — *Contributions to Plasma Physics*, 1994, vol. 34, № 2—3, p. 392—397.
8. **Reiter D., Baelmans M., Boerner P.** The EIRENE and B2-EIRENE codes. — *Fusion Science and Technology*, 2005, vol. 47, № 2, p. 172—186.
9. **Valanju P.M.** NUT: a fast 3-dimensional neutral transport code. — *J. of Computational Physics*, 1990, vol. 88, № 1, p. 114—130.
10. **Tendler M., Heifetz D.** Neutral particle kinetics in fusion devices. — *Fusion Technology*, 1987, vol. 11, № 2, p. 289—310.
11. **Stacey W.M., Mandrekas J.** A transmission/escape probabilities model for neutral particle transport in the outer regions of a diverted tokamak. — *Nuclear Fusion*, 1994, vol. 34, № 10, p. 1385.
12. **Semenets Yu.M., Khayrutdinov R.R.** A multigroup interface current method for neutral transport in tokamak edge and divertor plasma. Препринт ТРИНИТИ № 0095-А. — М.: ЦНИИатоминформ, 2002. 15 с.
13. **Pospieszczyk A. et al.** In situ measurement and modeling of hydrogen recycling and transport processes—the role of molecules. — *J. of Nuclear Materials*, 1999, vol. 266, p. 138—145.
14. **Stacey W.M.** *Nuclear Reactor Physics*. — Weinheim: Wiley-Vch, 2007.
15. **Case K.M., Placzek G., Hoffmann F.** *Introduction to the theory of neutron diffusion*. — Los Alamos Scientific Laboratory, 1953, vol. 1.
16. **Rubilar R., Stacey W.M., Mandrekas J.** Comparison of the TEP method for neutral particle transport in the plasma edge with the Monte Carlo method. — *Nuclear Fusion*, 2001, vol. 41, № 8, p. 1003.
17. **Reiter D., Baelmans M., Boerner P.** The EIRENE and B2-EIRENE codes. — *Fusion Science and Technology*, 2005, vol. 47, № 2, p. 172—186.
18. **Gryziński M.** Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions. — *Physical Review*, 1965, vol. 138, №. 2A, p. A336.
19. **Freeman R.L., Jones E.M.** Culham Laboratory Report CLM-R137. Abingdon, Oxon, United Kingdom, 1974.



Александр Андреевич Кожурин, лаборант-исследователь; НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1, Россия  
kozhurin.aa14@physics.msu.ru



Юрий Михайлович Семенец, с.н.с.; работал в ГИЦ РФ ТРИНИТИ, в настоящее время — пенсионер



Рустам Рашитович Хайрутдинов, в.н.с., д.ф.-м.н., лауреат премий им. И.В. Курчатова и А.П. Александрова, ветеран атомной энергетики и промышленности; НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1, Россия  
khayrutd@mail.ru



Виктор Эммануилович Лукаш, в.н.с., д.ф.-м.н., лауреат премий им. И.В. Курчатова и А.П. Александрова; НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, пл. Академика Курчатова 1, Россия  
Lukash\_VE@nrcki.ru

Статья поступила в редакцию 15 декабря 2020 г.  
После доработки 12 января 2021 г.  
Принята к публикации 14 января 2021 г.  
Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Термоядерный синтез, 2021, т. 44, вып. 1, с. 80—90.