

О верификации атомных данных по K_α -спектрам излучения токамака TEXTOR

А. М. Урнов, Ф. Ф. Горяев, Г. Берчингер⁺, Х.-И. Кунце^{+*}, О. Марчук⁺

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

⁺ Institut für Plasmaphysik, Forschungszentrum Jülich GmbH, Association Euroatom-KFA, Trilateral Euregio Cluster, 52425 Jülich, Germany

^{*} Institut für Experimentalphysik V, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum, Germany

Поступила в редакцию 7 февраля 2007 г.

После переработки 14 марта 2007 г.

Спектры высокого разрешения ионов Ar^{16+} и Ar^{15+} , измеренные на токамаке TEXTOR, были использованы для верификации атомных данных, необходимых для моделирования и диагностики горячей корональной плазмы, с точностью $\sim 5\%$. Использовался самосогласованный подход, основанный на решении обратной задачи итерационным методом Байеса (ИМБ) в рамках предложенной полуэмпирической “спектроскопической” модели (СМ). Расчеты атомных характеристик методом теории возмущений, выполненные для [He] и [Li] ионов аргона с помощью программ АТОМ и MZ, требуют коррекции отношений эффективных скоростей возбуждения интеркомбинационной линии [He] иона и группы диэлектронных сателлитов, соответствующих переходам $1s2p3l-1s^23l'$ в [Li] ионе, к резонансной линии [He] иона порядка 10%. Спектры, рассчитанные с учетом коррекции, согласуются с измеренными в пределах точности измерения $\lesssim 10\%$ в широком интервале значений центральной электронной температуры $\sim 0.8-2.5$ кэВ и плотности $\sim 10^{13}-10^{14}$ см⁻³. Установлено, что в рамках СМ центральное значение температуры может быть определено с точностью $\sim 5\%$, а обилии [Li] и [H] ионов аргона по отношению к плотности [He] ионов с точностью ~ 20 и 50% , соответственно. Показано, что использование изотермического приближения при измерении температуры по отношению интенсивностей диэлектронных сателлитов к резонансной линии может приводить к значительной погрешности $\sim 20\%$ при наличии градиентов, характерных для плазмы токамака.

PACS: 32.30.Rj, 32.70.-n, 32.80.Cy, 32.80.Dz, 52.55.Fa, 52.70.-m

1. Введение. В течение последних десятилетий K -спектры многозарядных ионов эффективно используются для измерения параметров высокотемпературной плазмы (см., например, [1, 2]). Начиная с работ [3, 4, 5], рентгеновская спектроскопия является одним из ведущих методов диагностики астрофизических объектов, включая солнечную корону [6], и термоядерной плазмы на современных токамаках [7]. Точность этих методов, а также возможность однозначной интерпретации спектров в значительной степени определяются точностью атомных данных, используемых при моделировании источников рентгеновского излучения. Тем не менее, число работ, посвященных исследованию этого, принципиального для теоретической спектроскопии, вопроса, невелико, и, таким образом, величина возможной погрешности столкновительных и радиационных характеристик многозарядных ионов остается неопределенной. В связи с отсутствием прямых пучковых измерений суждение об их точности опирается в настоящее время на сравнение либо с наиболее точными

(с теоретической точки зрения) расчетами [8], либо с данными пучково-пленочных экспериментов на установках типа EBIT [9, 10]. Обеспечивая наилучшую точность для длин волн, такие эксперименты не позволяют улучшить точность измерения $\sim 20-30\%$ для столкновительных характеристик из-за низкой статистики фотонов. В то же время для многих приложений, например, поляризационной спектроскопии, такая точность является недостаточной. В связи с этим вопрос верификации атомных данных является весьма актуальным как для атомной физики, стимулируя уточнение методов их расчета, так и для решения задач физики плазмы, основанных на результатах рентгено-спектральной диагностики.

В предыдущей работе [11] было показано, что отношения интенсивностей K_β -линий, рассчитанные “ab initio” в рамках столкновительно-радиационной модели, согласуются с данными ряда экспериментов в пределах ошибок измерений. Цель настоящей статьи – показать принципиальную возможность определения точности атомных данных по K_α -спектрам

примесей в плазме токамака с помощью самосогла-сованного подхода, основанного на решении обратной задачи в рамках предложенной полуэмпирической “спектроскопической” модели (СМ). Необходимые условия для реализации такого подхода были обусловлены следующими особенностями эксперимента на токамаке TEXTOR: высокой точностью измерения потоков, регистрацией спектров в различных условиях плазмы разряда и наличием дополнительных методик, позволяющих измерять радиальные профили электронной температуры и плотности одновременно со спектрами.

2. Постановка задачи. Исследуемый спектр ионов аргона в области длин волн 3.94–4.0 Å состоит из хорошо разрешенных максимумов или пиков интенсивности L , соответствующих спектральным линиям l , дающим основной вклад в их интенсивность. Наиболее интенсивными являются линии w , x , y и z , соответствующие резонансному $1s2p(^1P_1) - 1s^2(^1S_0)$, магнито-квадрупольному $1s2p(^3P_2) - 1s^2(^1S_0)$, интеркомбинационному $1s2p(^3P_1) - 1s^2(^1S_0)$ и запрещенному $1s2p(^3S_1) - 1s^2(^1S_0)$ переходам в ионе Ar^{16+} (здесь и ниже используются обозначения линий, предложенные в работе [4]). Помимо [He] линий в спектре присутствуют их диэлектронные сателлиты, соответствующие переходам $1s^2nl - 1s2pnl$ в [Li] и $1s^22snl - 1s2s2pnl$ в [Be] ионах. Наиболее яркие сателлиты q , r , k и a для $n=2$, а также две группы линий с $n=3$ и $n=3, 4$ на длинноволновом крыле резонансной линии w , обозначаемые ниже N_3 и N_4 , соответственно, хорошо разрешаются, а линия j блендируется линией z . Остальные сателлиты плотно заполняют весь спектральный диапазон, образуя серии, сходящиеся к [He] и [Li] линиям. Всю спектральную область удобно разделить на интервалы $\Delta\lambda_L = [L]$. Таким образом был определен следующий набор: $\{L\} = \{W, N_4, N_3, X, Y, Q, R, A, K, Z\}$.

Теоретический (синтетический) спектр $I(\lambda)$ и поток излучения $F_{[L]} = \int_{[L]} I(\lambda) d\lambda$ в спектральном интервале $[L]$ является функцией (функционалом) двух наборов физических характеристик: набора атомных данных (AD), включающего наборы атомных констант (длин волн, вероятностей переходов) и эффективных скоростей элементарных процессов $C_i^z(T_e)$, и параметров плазмы $PP = \{P(r)\}$ - радиальных профилей электронной T_e и ионной T_i температуры, электронной плотности N_e , плотности ионов аргона N_z с зарядом z и плотности нейтральных атомов водорода N_a . (Для центральных значений электронной температуры $T_e(0)$ и плотности $N_e(0)$ мы в дальнейшем будем использовать обозначения T и N , соответственно). Для заданной модели излучающей

плазмы, как будет показано ниже, можно определить основные – ведущие или “ключевые” – параметры $D = \{D_i\}$ и $\Phi = \{\Phi_i\}$ из соответствующих наборов AD и PP (такие, как температура T), либо связанные с ними (например, отношение скоростей возбуждения линий), однозначно (с заданной точностью) определяющие значения потоков в синтетическом спектре $F_{[L]}(syn) = F_{[L]}(D, \Phi)$. В рамках полуэмпирических моделей для “ab initio” расчетов $F_{[L]}(syn)$ эти параметры являются заданными, в то время как для задач диагностики они могут быть получены (в определенном классе искомых функций) при решении обратной задачи с помощью равенств: $F_{[L]}(exp) = F_{[L]}(D, \Phi)$, где $F_{[L]}(exp)$ обозначают потоки, измеренные в данном спектре. Эти равенства ограничивают возможные значения параметров модели, связывая их неявными функциональными соотношениями, которые в явной форме можно записать в виде

$$\Phi = \Phi(F_{[L]}^{exp}, D) \quad \text{или} \quad D = D(F_{[L]}^{exp}, \Phi). \quad (1)$$

Величины D и Φ должны также удовлетворять ряду дополнительных физических условий. Так, величины из набора D , полученные в процессе обращения разных спектров, должны, очевидно, совпадать (в пределах, связанных с погрешностью эксперимента), то есть не зависеть от условий в плазме; значения величин из набора Φ в данном спектре (например, центральной температуры) не должны зависеть от L , а радиальные профили относительных ионных обилий $n_z(r) = N_z / \sum_z N_z$, полученные при решении обратной задачи, для любого спектра должны подчиняться уравнению непрерывности

$$n(r) = \sum_z n_z(r) = 1, \quad (2)$$

которое (как показано ниже) не может выполняться при произвольно заданных атомных данных D . Приведенные соотношения и условия обеспечивают согласованность атомных и плазменных параметров, что означает существование области их значений M_o , для которой выполняются соотношения (1), (2) при заданной точности потоков в измеренном спектре $F_{[L]}^{exp}$, и используются в данной работе для их верификации. Основная задача настоящей работы – показать, что истинность параметров D и Φ предложенной нами СМ является необходимым и достаточным условием их согласованности в указанном выше смысле и что параметры, полученные оптимизацией решений обратной задачи итерационным методом Байеса (ИМБ), являются согласованными и, таким образом, достоверными.

3. Спектроскопическая модель. Полуэмпирическая СМ основана на следующих предположениях:

1) условия коронального приближения выполняются для населенностей возбужденных уровней N_z^k ($k > 1$);

2) профили относительных обилий ионов $n_z(r)$ являются параметрами модели и удовлетворяют уравнению непрерывности (2); профили электронной температуры $T_e(r)$ и плотности $N_e(r)$ измерены.

В горячей плазме в условиях коронального равновесия, предполагающего квазистационарное состояние плазмы ($\partial_t N_z^k = 0$), эффекты радиационного и ионного переноса для возбужденных состояний пренебрежимо малы, а их населенности $N_z^k \ll N_z^1$, в связи с чем плотности ионов (ионные обилия) практически равны населенностям основных состояний $N_z \cong N_z^1$. Расчеты, выполненные в рамках столкновительно-радиационной модели для ионов аргона [11], показали отклонение от коронального приближения $\lesssim 1\%$ для населенностей уровней с $n=2$ при электронной плотности 10^{14} см^{-3} ; таким образом, для меньших плотностей условие 1) является обоснованным. Следует отметить, что для значений электронной плотности, типичных для плазмы токамака TEXTOR, ионные концентрации N_z не равны концентрациям N_z^C в корональном приближении, используемом для плазмы солнечной короны (корональное ионизационное равновесие), а подчиняются кинетическим уравнениям баланса, учитывающим эффекты переноса и перезарядки ионов примеси на нейтральных атомах водорода; роль этих эффектов была исследована в работе [12] с помощью модели транспорта примеси (МТП). В корональном приближении поток излучения в спектральном интервале $[\sigma]$, выходящий из объема плазменного столба вдоль радиуса $r = \rho a$, можно представить в виде суммы $F_{[\sigma]} = \sum_z F_{[\sigma]}^z$ по парциальным потокам $F_{[\sigma]}^z$

$$F_{[\sigma]}^z = C \int_0^1 J_{[\sigma]}^z(P(\rho)) n_z(\rho) [N_e(\rho)]^2 d\rho, \quad (3)$$

где $J_{[\sigma]}^z$ - парциальные скорости возбуждения

$$J_{[\sigma]}^z(T_e, T_i, n_a) = \sum_l C_l^z(T_e, n_a) \mathcal{L}_{[\sigma]}^l(T_i). \quad (4)$$

Здесь $P = \{T_e, T_i, n_a\}$; C_l^z - эффективные скорости, соответствующие процессам возбуждения линий из ионов с зарядом z ($z = 15-17$), включающие каскады с верхних уровней и коэффициент ветвления k_l для линии l ; C - переходный калибровочный коэффициент; $\mathcal{L}_{[\sigma]}^l(T_i) = \int_{[\sigma]} \mathcal{L}_l(T_i; \lambda - \lambda_l) d\lambda$ - поправочный коэффициент, связанный с профилем линии $\mathcal{L}_l(T_i; \lambda)$, который учитывает естественную ширину, доплеровское

уширение и влияние аппаратной функции; a - малый радиус плазменного тора; $n_a = N_a/N_e$ - относительная плотность нейтральных атомов водорода.

Парциальная скорость возбуждения $J_{[\sigma]}^z(T_e, T_i, n_a)$ пика L , определенная выражением (4), является суммарной эффективной скоростью образования всех линий, вносящих вклад в его интенсивность и возбуждаемых из ионов с зарядом z . Для заряда $z=16$ (ниже обозначаемого также через he) парциальная скорость $J_{[L]}^{he}$ соответствует возбуждению линий $[He]$ ионов прямым электронным ударом ($[He]$ линии) и скорости диэлектронного захвата из $[He]$ ионов в возбужденные состояния диэлектронных сателлитов, излучаемых $[Li]$ ионами; для $[Li]$ ионов ($z=15$ или li) в $J_{[L]}^{li}$ входит скорость возбуждения внутренней оболочки $[Li]$ сателлитов, а также ионизации $1s$ -электрона при возбуждении линии z ; для $[H]$ ионов ($z=17$ или h) величина $J_{[L]}^h$ содержит полную скорость рекомбинации $[H]$ ионов в возбужденные состояния $[He]$ ионов $C_i^h = C_i^h(rad) + n_a C_i^h(cxr)$, где $C_i^h(rad)$ - скорость излучательной рекомбинации, включая диэлектронную, а $C_i^h(cxr)$ - скорость рекомбинации за счет перезарядки на нейтральных атомах водорода. Таким образом, парциальные скорости возбуждения $J_{[\sigma]}^z$ определяются как атомными характеристиками, являющимися функциями плазменных параметров T_e, T_i и n_a (для $z=h$), так и радиальными распределениями этих параметров.

Для формулировки СМ и определения ее параметров путем решения обратной задачи необходимо факторизовать в подынтегральном выражении равенства (3) зависимость от радиальных профилей плазменных параметров $n_z(\rho)$, $N_e(\rho)$ и $T_e(\rho)$, заменяя радиальную переменную ρ на безразмерную температурную переменную $\beta(\rho) = [T_e(\rho)]^{-1} - 1$:

$$F_{[\sigma]}^z(T) = C \int_0^b J_{[\sigma]}^z(T, \beta) n_z(\beta) y(\beta) d\beta \quad (5)$$

где $y(\beta) = [N(\rho(\beta))]^2 \left| \frac{d\rho}{d\beta} \right|$ - дифференциальная мера эмиссии (ДМЭ), а верхний предел интегрирования $b = \beta(1) \gg 1$. В β -представлении (5), в отличие от ρ -представления (3), величины $J_{[\sigma]}^z$ определяются атомными характеристиками (при заданных $T_i(\beta)$ и $n_a(\beta)$) и не зависят от радиальных профилей электронной температуры $T_e(\rho)$ (с целью упрощения обозначений мы будем опускать зависимость $J_{[\sigma]}^z$ от профилей $T_i(\beta)$ и $n_a(\beta)$, учитываемых в дальнейших расчетах; заметим, что учет этих профилей практически не сказывается на результатах верификации AD). Для использования теоремы Байеса необходимо также перейти от абсолютных - полных $F_{[L]}$ и

парциальных $F_{[L]}^z$ потоков в пиках, к относительным $\Gamma_{[L]}(\sigma) = F_{[L]}^z / F_{[\sigma]}^z$ и $P_{[L]}^z = F_{[L]}^z / F_{[\sigma]}^z$, нормированным в трех специально выбранных для каждого z спектральных областях $[\sigma_z]$.

Для выбора $[\sigma_z]$ рассмотрим три группы пиков $\mathbf{Z} = \{\mathbf{L}_i\}$, принадлежащих трем, вообще говоря пересекающимся, спектральным интервалам $[\sigma_z] = \mathbf{Z}$, включающим линии, возбуждаемые из ионов с зарядом z и обозначаемых соответственно $\mathbf{Z} = \mathbf{Li}, \mathbf{He}, \mathbf{H}$. Поделив обе части равенства (5) для потоков в пике $\mathbf{L} \subset [\mathbf{Z}]$ на поток $F_{[\mathbf{Z}]}$ в области $[\mathbf{Z}]$, получим выражения для относительных потоков $\Gamma_{[L]} = \sum_k F_{[L]}^k / F_{[\mathbf{Z}]}$, которые можно преобразовать к виду

$$\Gamma_{[L]} = \sum_{k \in \mathbf{K}} \frac{F_{[K]} F_{[K]}^k}{F_{[\mathbf{Z}]} F_{[K]}^k} \frac{F_{[L]}^k}{F_{[K]}^k} = \sum_{k \in \mathbf{K}} R_{\mathbf{Z}}^k \Gamma_{[K]}^k P_{\mathbf{L}}^k, \quad (6)$$

где введено обозначение $R_{\mathbf{Z}}^k$ для отношения потоков в двух группах пиков $[\mathbf{K}]$ и $[\mathbf{Z}]$ и $\Gamma_{[K]}^k$ для отношения парциального потока $F_{[K]}^k$ к соответствующему полному потоку в области $[\mathbf{K}]$. Определив для каждой области $[\mathbf{Z}]$ относительные парциальные скорости возбуждения $p_{[L]}^k$ пиков $\mathbf{L} \subset \mathbf{Z}$ и, в качестве плазменных параметров, функции Φ_z равенствами

$$p_{[L]}^k(T, \beta) = \frac{J_{[L]}^k(T, \beta)}{J_{[K]}^k(T, \beta)}, \quad J_{[K]}^k(T, \beta) = \sum_{\mathbf{L} \subset \mathbf{K}} J_{[L]}^k(T, \beta), \quad (7)$$

$$\Phi_z(T, \beta) = C J_{[\mathbf{Z}]}^z(T, \beta) n_z(T, \beta) y(\beta) / F_{[\mathbf{Z}]}^z, \quad (8)$$

удовлетворяющие условиям нормировки

$$\int_0^b \Phi_z(T, \beta) d\beta = 1, \quad \sum_{\mathbf{L} \subset \mathbf{Z}} p_{[L]}^z(T) = 1, \quad (9)$$

получим выражения для парциальных потоков $P_{[L]}^k(T)$, нормированных в интервалах $[\mathbf{Z}]$:

$$P_{[L]}^k(T) = \int_0^b p_{[L]}^k(T, \beta) \Phi_k(T, \beta) d\beta, \quad (10)$$

$$P_{[\mathbf{Z}]}^z(T) = \sum_{\mathbf{L}} P_{[L]}^z(T) = 1.$$

Выбор областей $[\sigma_z]$ обусловлен двумя условиями: максимальным вкладом в каждую область $[\mathbf{Z}]$ парциальных потоков $F_{\mathbf{L}}^z$ ($\mathbf{L} \subset \mathbf{Z}$), имеющих различную зависимость от β , и минимальным вкладом парциальных потоков $F_{\mathbf{L}}^k$ для ионов других кратностей $k \neq z$. В данной работе использовались следующие группы пиков: $\mathbf{He} = \{\mathbf{W}, \mathbf{N}_4, \mathbf{N}_3, \mathbf{K}\}$; $\mathbf{Li} = \{\mathbf{Q}, \mathbf{R}, \mathbf{Z}\}$; $\mathbf{H} = \{\mathbf{W}, \mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}\}$.

Отметим, что относительные парциальные потоки $\Gamma_{[\mathbf{Z}]}^z$ в трех спектральных интервалах $[\mathbf{Z}]$ ($\mathbf{Z} = \mathbf{Li}, \mathbf{He}, \mathbf{H}$) выражаются через отношения потоков $R_{\mathbf{Z}}^k$ и нормированные интегралы $P_{[\mathbf{Z}]}^k(T) = \sum_{\mathbf{L} \subset \mathbf{Z}} P_{[L]}^k(T)$, определенные в (10), путем решения системы уравнений (6) для всех \mathbf{Z} , полагая в левой части (6) $\Gamma_{[\mathbf{Z}]} = \sum_{\mathbf{L}} \Gamma_{\mathbf{L}} = 1$. Таким образом, в СМ относительные потоки $\Gamma_{[L]}$ в выражении (6) определяются, как видно из (10), тремя ключевыми плазменными параметрами (β -профилями) $\Phi_z(\beta)$ и ядрами $p_{[L]}^z(\beta)$ интегрального оператора, являющимися нормированными парциальными скоростями возбуждения. Эти ядра зависят от набора атомных данных, центральных температур плазменного кора T , T_i и (для $z = h$) от профиля $n_a(\beta)$. В том случае, когда потоки интенсивностей в пиках $\Gamma_{[L]}$ фиксированы в левых частях уравнения (6) условием $\Gamma_{[L]} = \Gamma_{[L]}^{\text{exp}}$, три нормированных β -профиля $\Phi_z(\beta)$ (для $z = li, he, h$), как видно из (6), зависят только от тех параметров, которые являются аргументами величин $p_{[L]}^z$.

Если все относительные потоки $\Gamma_{[L]}$ и AD известны (фиксированы), то функции $\Phi_z(T, \beta)$ могут быть найдены путем решения обратной задачи для группы уравнений (6)-(10) при заданных значениях T , T_i и $n_a(\beta)$. Для определения этих параметров необходимо использовать дополнительное условие модели (2), которое ограничивает класс возможных формальных решений этих уравнений $\{\Phi_z^{Inv}(\beta)\}$. Поскольку этот критерий выражается в терминах относительных ионных обилий $n_z(\beta)$, а не функций $\Phi_z(\beta)$, связанных с $n_z(\beta)$ соотношениями (8), необходимо использовать дополнительную информацию о профиле ДМЭ $y(\beta)$, зависящем от профиля температуры $T_e(\beta)$ и плотности $N_e(\beta)$. Обилия $n_z(\beta)$ и их сумма $n(\beta)$ для $z = 15, 16, 17$ (li, he, h) выражаются через величины $\Phi_z(\beta)$ и $n_{he}(\beta)$ с помощью равенств (8).

4. Итерационный метод Байеса. Для решения обратной задачи спектроскопии с целью определения профилей $\Phi_z(\beta)$ в рамках СМ мы использовали ИМБ, апробированный в различных спектроскопических задачах (см., например, [13, 14]).

Определяя величины $P_{[L]}^z(\text{exp})$ и $\Gamma_{[L]}^z(\text{exp})$ с помощью выражений

$$P_{[L]}^z(\text{exp}) = \frac{\Gamma_{[L]}^z(\text{exp})}{\Gamma_{[\mathbf{Z}]}^z}, \quad (11)$$

$$\Gamma_{[L]}^z(\text{exp}) = \Gamma_{[L]}^{\text{exp}} - \sum_{k \neq z} \Gamma_{[L]}^k \quad \text{для } \mathbf{L} \subset [\mathbf{Z}]$$

и используя формулу (6) и определение $P_{[L]}^z$ в (10) при условии $P_{[L]}^z(\text{exp}) = P_{[L]}^z(T)$, приходим к системе согла-

сованных уравнений для $z = li, he, h$ и $\mathbf{L} \subset [\mathbf{Z}]$ при $\mathbf{Z} = z$:

$$P_{[\mathbf{L}]}^z(\text{exp}) = \int_0^{\beta_1} p_{[\mathbf{L}]}^z(T, \beta) \Phi_z(T, \beta) d\beta, \quad (12)$$

которую, благодаря условиям нормировки (9), можно рассматривать в качестве системы байесовских соотношений между вероятностью $P_{[\mathbf{L}]}^z(T)$ излучения фотонов в пике \mathbf{L} и произведением условной вероятности $p_{[\mathbf{L}]}^z(T, \beta)$ случайного процесса при некотором значении величины β (локальная температура) и распределением вероятности $\Phi_z(T, \beta)$ для этой величины. Такая интерпретация уравнений (12) позволяет использовать соотношения статистической физики, рассматривая величины в левой части как среднее распределение по \mathbf{L} , а распределения $\Phi_z(T, \beta)$ – как наиболее вероятное решение.

Для каждого уравнения (12), соответствующего $z = \mathbf{Z}$, применялась итерационная процедура, основанная на теореме Байеса (см. [14]):

$$\Phi_z^{N+1}(\beta) = \Phi_z^N(\beta) \sum_{\mathbf{L} \subset \mathbf{Z}} \frac{P_{[\mathbf{L}]}^z(\text{exp}) p_{[\mathbf{L}]}^z(T, \beta)}{\int_0^{\beta_1} p_{[\mathbf{L}]}^z(T, \beta) \Phi_z^N(\beta) d\beta}. \quad (13)$$

Для оценки сходимости применялся метод χ^2 . Значения отношений парциальных потоков $\Gamma_{[\mathbf{L}]}^k(N)$ и $\Gamma_{[\mathbf{Z}]}^z(N)$ для N -й итерации вычислялись по формулам, полученным с помощью системы уравнений (6)-(10), в которых использовались отношения измеренных потоков для $\Gamma_{[\mathbf{L}]}(\text{exp})$ и $R_{\mathbf{Z}}^{\mathbf{K}}(\text{exp}) = F_{[\mathbf{K}]}^{\text{exp}} / F_{[\mathbf{Z}]}^{\text{exp}}$. Для нулевого приближения $\Phi_z^0(\beta)$ использовались корональные обилия $n_z^C(\beta)$, а для скоростей рекомбинации $J_{[\mathbf{L}]}^h$ – профили $n_a(\beta)$, рассчитанные в [12]. Параметр T и поправочные факторы для атомных параметров были определены путем минимизации величин χ^2 и $\delta = |n(\beta)/n(\beta_c) - 1|$.

5. Результаты измерений и расчетов. Измерения спектров со спектральным разрешением $\lambda/\delta\lambda \cong 5000$ были выполнены брэгговским спектрометром с пропорциональным счетчиком фотонов. Подробное описание эксперимента дано в работе [7]. В данной работе приводятся результаты исследования спектров K_α -излучения ионов Ar^{16+} и Ar^{15+} , измеренных в широкой области температур $T=0.8-2.5$ кэВ и плотностей $N = 10^{13}-10^{14}$ см $^{-3}$ и содержащих 10 хорошо разрешенных пиков, состоящих из спектральных линий с различной чувствительностью к плазменным параметрам модели. Были также использованы радиальные профили электронной температуры $T_e(r)$ и плотности $N_e(r)$, измеренные для каждого спектра с помощью электрон-циклотронного излучения (ЕСЕ) и инфракрасного интерферометра-полихроматора (ФИП), соответственно.

Для расчета банка атомных данных в настоящей работе использовался метод теории возмущений по обратным степеням заряда ядра Z_n (метод Z -разложения) на нерелятивистском базисе с учетом релятивистских поправок в рамках оператора Брейта. Расчеты столкновительных и спектральных характеристик были выполнены соответственно с помощью программ АТОМ и MZ [15]. Для диэлектронных сателлитов был учтен ряд поправок, в частности, эффекты второго порядка для автоионизационных ширин за счет экранирования заряда ядра, существенно (до 50% и более) изменившие их значения, соответствующие данные приведены в работе [16]. Детали расчетов, а также подробный анализ свойств решений ИМБ в рамках самосогласованного подхода и его применение к проблеме верификации атомных характеристик на основе данных эксперимента на токамаке TEXTOR будут представлены в других публикациях. Ниже приведены основные результаты этих исследований.

На рис.1 и 2 показано, как условие оптимизации решений ИМБ с помощью критериев χ^2 и δ , которое

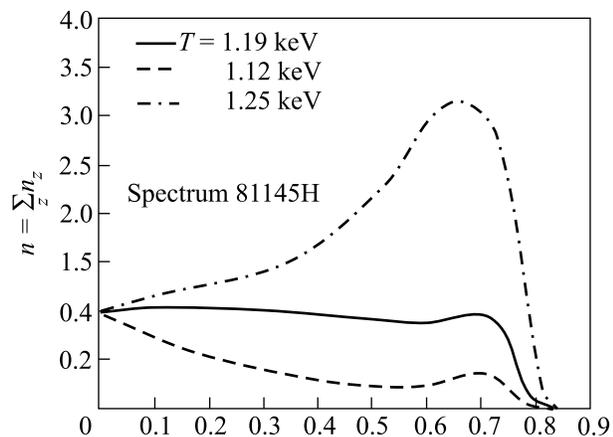


Рис.1. Зависимость суммы относительных ионных обилий $n(\rho)$ (2) от вариации центрального значения температуры T

содержит функции в широкой области β , приводит к весьма сильному ограничению на возможные решения $\Phi_z^{Inu}(\beta)$ при 5% вариации значений параметров СМ, например, значения температуры T или эффективных скоростей возбуждения группы сателлитов N_3 . Благодаря этим ограничениям, значения параметров СМ, выходящих за область их оптимизации M_o , оказываются несовместимыми одновременно и с уравнениями (6)-(10) и условиями минимизации величин χ^2 и δ . В терминах обратной задачи это означает, что при заданной нами точности описания измеренных спектров ($\lesssim 10\%$) не существует возмож-

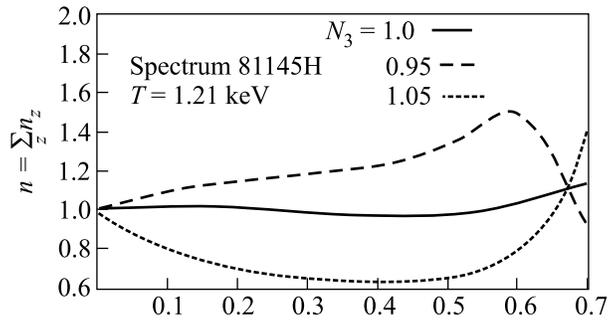


Рис.2. Зависимость суммы относительных ионных обилий $n(\rho)$ (2) от вариации относительной эффективной скорости возбуждения $\alpha_i(T)$ для группы диэлектронных спутников N_3

ных решений ИМБ для значений параметров, не принадлежащих M_o , то есть они не являются согласованными в указанном в п.2 смысле и, таким образом, достоверными, поскольку таковые, очевидно, должны быть согласованными. Расчеты показали, что решения, полученные для функций $\Phi_z(\beta)$ и соответствующих ионных обилий $n_z(\beta)$, являются выпуклыми и устойчивы по форме относительно варьирования этих данных. Этот результат соответствует теореме о корректности обратной задачи для линейных операторов на множестве выпуклых решений (см. [17]) и указывает на то, что ИМБ с выбранным нами критерием оптимизации решений является регуляризирующим алгоритмом.

Исследование зависимости функций $\Phi_z^{Inv}(\beta)$ от их аргументов позволило найти ключевые параметры и установить область M_o их согласованности с измеренными спектрами: набор $\mathbf{D} = \{\alpha_i\}$ содержит отношения эффективных скоростей возбуждения $\alpha_i = C_i^{he}/C_w^{he}$ для [He] линий x, y, z , спутника k и группы спутников N_3 , а набор $\Phi = \{T, \Phi_z(\beta)\}$; область M_o соответствует отклонению величин $\alpha_i(T)$ и T от оптимизированных значений в пределах $\sim 5\%$. Для коррекции величин $\alpha_i(T)$ были введены факторы $\gamma_i = \alpha_i/\alpha_i^{cor}$.

Сравнение измеренных отношений потоков \mathbf{X}, \mathbf{Y} и \mathbf{Z} к \mathbf{W} с рассчитанными (с учетом фактора γ для \mathbf{y} линии (1.1) и спутников группы N_3 (1.05)) в 7 исследованных спектрах обнаружило согласие в пределах, соответственно, 8, 2 и 3%, а для N_3/\mathbf{W} и N_3/\mathbf{K} отношений – 9%, что указывает на высокую точность измерения и расчета потоков. Важно отметить, что возможная ошибка в величине радиальных профилей нейтральных атомов водорода приводит к значительной погрешности для центральных значений относительных ионных обилий ($\sim 20\%$ для $\tilde{n}_{li}(0)$ и $\sim 50\%$ для $\tilde{n}_h(0)$), однако практически не сказывается на результатах расчета потоков. Центральные значения

ионных обилий [Li] ионов, $\tilde{n}_{li}(0)$, и [H] ионов, $\tilde{n}_h(0)$, полученные с помощью СМ для исследованных спектров, находятся в хорошем согласии с результатами расчетов в рамках МТП в работе [12]. Центральные значения температуры T , полученные из спектров с использованием только нормированных профилей температуры и плотности, находятся в хорошем согласии (в пределах 5%) с абсолютными измерениями ЕСЕ.

Важным результатом является также определение величин $G_{\mathbf{W}}^L = (P_{[\mathbf{L}]}^L/P_{[\mathbf{W}]}^L) \cdot (P_{[\mathbf{W}]}^C/P_{[\mathbf{L}]}^C)$, которые характеризуют отклонение отношений потоков в интервалах $[\mathbf{L}]$ и $[\mathbf{W}]$, вычисленные с учетом радиальных профилей, от относительных потоков в приближении кора $P_{[\sigma]}^C \propto \sum_z J_{[\sigma]}^z(T, T_i) n_z(T)$. В частности, для отношения потоков \mathbf{K}/\mathbf{W} (традиционно используемого для измерения температуры) эти отношения для анализируемых спектров изменяются в пределах 1.24–1.5, что указывает на возможность значительной ошибки $\sim 10\text{--}20\%$ в определении T_e в рамках однотемпературной модели при наличии градиентов температуры и плотности в исследуемой плазме.

6. Выводы. Предложенный в работе самосогласованный подход к описанию результатов эксперимента на токамаке TEXTOR, основанный на СМ, дает возможность верифицировать методы расчета атомных данных, необходимых для моделирования K -спектров излучения многозарядных ионов, с точностью $\sim 5\%$. Расчеты методом Z -разложения по обратным степеням заряда ядра Z_n , выполненные для [He] и [Li] ионов аргона с помощью программ АТОМ и MZ, требуют коррекции отношений эффективных скоростей возбуждения интеркомбинационной линии \mathbf{u} и группы диэлектронных спутников N_3 к резонансной линии \mathbf{w} порядка 10%. Спектры, рассчитанные с учетом фактора коррекции, согласуются с измеренными в широком интервале центральных значений температур $T = 0.8\text{--}2.5$ кэВ и плотностей $N = 10^{13}\text{--}10^{14}$ см $^{-3}$ в пределах точности измерения $\lesssim 10\%$. Пример сравнения спектра, рассчитанного с центральной температурой $T=1.21$ кэВ до и после коррекции атомных данных, с измеренным на токамаке TEXTOR приведен на рис.3. В рамках СМ центральное значение температуры может быть определено с точностью $\sim 5\%$, а относительных ионных обилий $\tilde{n}_{li}(0)$ и $\tilde{n}_h(0)$ – с точностью ~ 20 и 50%, соответственно. Использование изотермического приближения при измерении температуры по отношению интенсивностей диэлектронных спутников к резонансной линии может приводить к значительной погрешности $\sim 10\text{--}20\%$ при наличии градиентов, характерных для плазмы токамака.

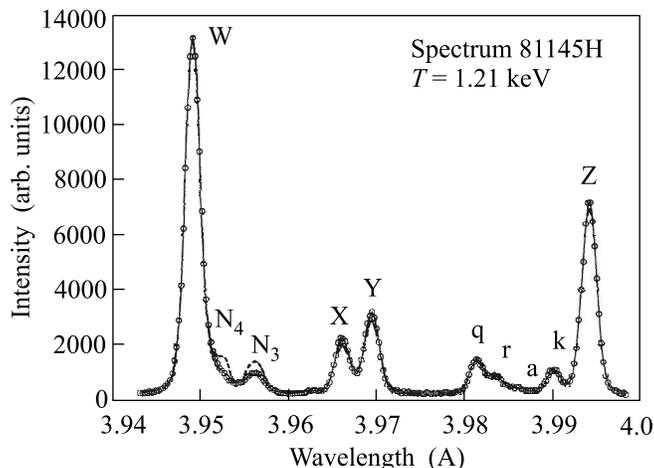


Рис. 3. Сравнение K -спектра аргона в области 3.94–4.0 Å, измеренного с помощью токамака TEXTOR (кружочки), с рассчитанным в настоящей работе для центральной температуры $T=1.21$ кэВ с учетом коррекции атомных данных (сплошная линия). Пунктирной линией показаны участки спектра, рассчитанные без коррекции атомных данных, для которых эксперимент и теория имели заметные отличия (пики N_4 , N_3 , X , Y , Z)

Авторы признательны Др.М. Биттеру и С.Н. Опарину за помощь в работе и ценные советы. Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований # 06-02-16298; # 05-02-17415 и грантом Секции физических наук РАН “Оптическая спектроскопия и стандарты частоты”.

1. У.И. Сафронова, *Спектроскопия многозарядных ионов в горячей плазме*, М.: Наука, 1991.

2. А. В. Боровский, С. А. Запругаев, О. И. Зацаринный, Н. Л. Манаков, *Плазма многозарядных ионов*, С.-Петербург: Химия, 1995.
3. А. Н. Gabriel and C. Jordan, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **145**, 241 (1969).
4. А. Н. Gabriel, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **169**, 99 (1972).
5. Л. П. Пресняков, А. М. Урнов, *Известия АН СССР, Серия физ.* **53**, 1704 (1989).
6. А. М. Urnov, *J. Phys. B* **28**, 1 (1995).
7. G. Bertschinger and W. Biel, The TEXTOR-94 Team, *Physica Scripta T* **83**, 132 (1999).
8. A. D. Whiteford, N. R. Badnell, C. P. Ballance et al., *J. Phys. B* **34**, 3179 (2001); A. D. Whiteford, N. R. Badnell, C. P. Ballance et al., *J. Phys. B* **35**, 3729 (2002).
9. P. Beiersdorfer, A. L. Osterheld, T. W. Phillips et al., *Phys. Rev. E* **52**, 1980 (1995).
10. A. J. Smith, P. Beiersdorfer, V. Decaux et al., *Phys. Rev. A* **54**, 462 (1996).
11. Ф. Ф. Горяев, А. М. Урнов, Г. Берчингер и др., *Письма в ЖЭТФ* **78**, 816 (2003).
12. О. Marchuk, M. Z. Tokar, G. Bertschinger et al., *Plasma Phys. Control. Fusion* **48**, 1633 (2006).
13. И. А. Житник, В. В. Корнеев, В. В. Крутов и др., *Труды ФИАН* **179**, 39 (1987).
14. А. М. Урнов, С. В. Шестов, С. А. Богачев и др., *Письма в Астроном. ж.* **33**, No 6 (2007, в печати).
15. V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, *Atomic Physics for Hot Plasmas*, IPP Bristol and Philadelphia, 1993.
16. F. F. Goryaev, A. M. Urnov, and L. A. Vainshtein, *ArXiv: physics/0603164* (2006).
17. А. Н. Тихонов, А. В. Гончаровский, В. В. Степанов, А. Г. Ягола, *Численные методы решения некорректных задач*, М.: Наука, 1990.