



37

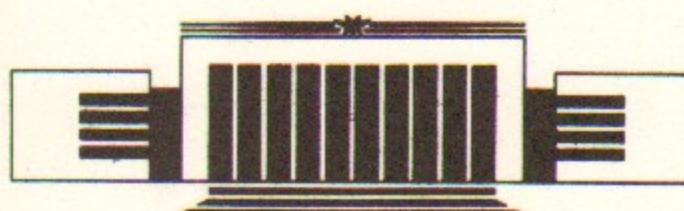
41

Государственный научный центр  
Российской Федерации  
Институт ядерной физики  
им. Г.И. Будкера

Ю.А. Цидулко

МЕТОД НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ  
В ЗАДАЧЕ О НАХОЖДЕНИИ  
ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ  
БЫСТРЫХ ИОНОВ

ИЯФ 95-64



НОВОСИБИРСК

Метод наименьших квадратов в задаче  
о нахождении функции распределения быстрых ионов

---

Ю.А. Цидулко

Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера  
630090, Новосибирск, Россия

**Аннотация**

Обсуждается численный метод решения линейного кинетического уравнения для быстрых ионов в аксиально симметричных ловушках. Метод заключается в аппроксимации искомой функции распределения линейной комбинацией базисных функций и минимизации среднеквадратичной разницы между левой и правой частями уравнения. Два предварительных этапа: редукция размерности пространства с учетом эффекта фазового размешивания и перемасштабирование, учитывающее априорную информацию о функции распределения, позволяют существенно сократить необходимое число базисных функций. Специальный способ ортогонализации базисных функций, позволяет сделать схему консервативной. Соответствующий численный код протестирован на задачах, имеющих точные аналитические решения.

## 1 Введение

В источнике нейтронов на базе газодинамической ловушки [1] предполагается, что быстрые ионы составляют основную долю плотности плазмы. Этот факт делает задачу о нахождении функции распределения быстрых ионов  $f(v, r, t)$  существенно нелинейной. В общем случае функция  $f$  является функцией от семи аргументов. Дополнительными осложняющими факторами являются сильные неоднородности параметров задачи как вдоль силовых линий магнитного поля на масштабе баунс длины, так и поперек на масштабе ларморовского радиуса быстрых ионов.

С другой стороны, коэффициенты в кинетическом уравнении для функции  $f$  являются интегралами от  $f$  и поэтому слабо зависят от тонких деталей функции распределения (см. например [2]). Этот факт позволяет на временах, сравнимых с временем столкновения, рассматривать уравнение как линейное. Таким образом вся задача сводится к итерационной схеме, где на каждом этапе решается линейная задача, являющаяся предметом рассмотрения настоящей работы.

Отметим, что существенными требованиями к линейному этапу решения, с точки зрения использования его в итерационной процедуре полной задачи, являются консервативность и высокая эффективность линейного алгоритма.

Уравнение Фоккер-Планка по сути является уравнением диффузии (главным образом в пространстве скоростей), поэтому его решения в

определенном смысле всегда гладкие (то есть, амплитуда высших производных быстро падает с ростом номера производной). Поэтому аппроксимации таких решений линейными комбинациями гладких базисных функций с минимизацией среднеквадратичного отклонения содержат погрешности, быстро уменьшающиеся с ростом числа базисных функций. В частности, погрешность при аппроксимации полиномами падает по крайней мере как  $N_{\Phi}^{-\xi N_{\Phi}}$ , где  $N_{\Phi}$  — число базисных функций (в этом примере, полиномов), а  $\xi$  — некая положительная константа. Этот факт позволяет надеяться на высокую эффективность метода, использующего такое разложение для получения уравнений на коэффициенты разложения. Кроме того, такой подход позволяет универсальным образом строить консервативные схемы, точно сохраняющие, в частности, количество частиц и энергию.

Два предварительных этапа: редукция размерности пространства с учетом эффекта фазового размешивания и пересштабирование, учитывающее информацию о функции распределения, полученную из аналитического решения приближенных уравнений, позволяют существенно сократить необходимое число базисных функций.

Наконец заметим, что ключевыми элементами в рассматриваемом алгоритме являются SVD-процедура сингулярного разложения матриц (SVD - singular value decomposition) [3] и процедура нахождения собственных векторов и собственных значений матриц, для которых в математических библиотеках существуют высокоэффективные коды.

Ниже мы будем придерживаться следующего плана изложения. В разделе 2 приведена общая постановка задачи, в 3-ем разделе рассмотрено усреднение кинетического уравнения по фазам, сопряженным с адиабатическими инвариантами. В 4-ом разделе обсуждается пересштабирование пространства, учитывающее априорную информацию о функции распределения, а в 5-ом — аппроксимация коэффициентов кинетического уравнения.

В разделе 6 рассмотрено применение метода наименьших квадратов в простейшем виде для решения кинетического уравнения. Раздел 7 посвящен построению консервативного разложения функции по заданному базису. В разделе 8 обсуждается применение метода к дифференциальному уравнению с граничными условиями. В 9-ом разделе приведено краткое описание созданного кода, а в 10-ом разделе — применение его к модельной задаче решения упрощенного кинетического уравнения для быстрых ионов.

В заключении приведен список этапов, которые нужно еще пройти для получения законченной методики решения задачи о функции распре-

деления частиц в ловушках типа "Водородный прототип" и "Генератор нейтронов".

## 2 Общая постановка задачи

В достаточно общем случае математическая постановка линейной задачи сводится к кинетическому уравнению для функции распределения частиц сорта  $\alpha$

$$\frac{d_{\alpha}f_{\alpha}}{dt} = \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{C}^{\alpha/\beta} \{f_{\alpha}|f_{\beta}\} + \sum_{\beta, \gamma \neq \alpha} \hat{B}^{\beta, \gamma \rightarrow \alpha} \{f_{\beta}|f_{\gamma}\} - f_{\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{K}^{\alpha, \beta \rightarrow} \{f_{\beta}\}, \quad (1)$$

где  $f_{\alpha}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  — функция распределения в фазовом пространстве координат  $\mathbf{r}$  и импульсов  $\mathbf{p}$   $\alpha$ -ого сорта частиц с массой  $m_{\alpha}$  и зарядом  $e_{\alpha}$ : электронов, ионов основной плазмы и примесей, нейтральных атомов различных сортов и нейтронов,

$$\frac{d_{\alpha}}{dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + v_{\alpha, k} \frac{\partial}{\partial x_k} + \mathcal{E}_{\alpha, k} \frac{\partial}{\partial p_k}$$

производная по времени  $t$  вдоль траектории,

$v_{\alpha} = [\mathbf{p} - (e_{\alpha}/c)\mathbf{A}]/m_{\alpha}$  — скорости частиц  $\alpha$ -ого сорта,

$\mathcal{E}_{\alpha, k} = e_{\alpha}[(v_{i, \alpha}/c)\partial A_i/\partial r_k - \partial \varphi/\partial r_k]$ , где  $\mathbf{A}$  и  $\varphi$  — векторный и скалярный потенциалы электромагнитного поля.

Кулоновский столкновительный оператор для заряженных частиц (ионов и электронов) может быть записан в следующей форме [4]

$$\hat{C}^{\alpha/\beta} \{\tilde{f}_{\alpha}|\tilde{f}_{\beta}\} = -\frac{\partial}{\partial v_{\alpha, i}} \left[ \frac{1}{m_{\alpha}} \mathcal{F}_i^{\alpha/\beta} \tilde{f}_{\alpha} - D_{ik}^{\alpha/\beta} \frac{\partial \tilde{f}_{\alpha}}{\partial v_{\alpha, k}} \right], \quad (2)$$

где функции распределения  $\tilde{f}$  есть функции от времени, координат и скоростей:  $\tilde{f}_{\alpha}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) = f_{\alpha}(t, \mathbf{r}, m_{\alpha}\mathbf{v} + (e_{\alpha}/c)\mathbf{A})/m_{\alpha}^3$ .

В целях полноты изложения известные выражения для коэффициента силы динамического трения  $\mathcal{F}$  и тензорного коэффициента диффузии  $D$  для общего случая и для случая максвелловской мишенной плазмы приведены в Приложении I.

Операторы "рождения"  $\hat{B}^{\beta, \gamma \rightarrow \alpha}$  и "уничтожения"  $\hat{K}^{\alpha, \beta \rightarrow}$  описывают парные взаимодействия, приводящие к переходу частиц из одного сорта в другой (ионизацию, рекомбинацию, перезарядку, ядерные реакции). Излагаемая ниже методика во многих отношениях применима и к задачам,

включающим в рассмотрение эти процессы, но в настоящей работе мы, для простоты, почти всюду их опускаем.

### 3 Редукция фазового пространства для быстрых ионов

Канонические преобразования от исходных переменных  $p_i, r_k$  к переменным действие – угол  $I_i, \phi_k$  в силу предполагаемого сохранения адиабатических инвариантов  $I_i$  ( $I_1$  — магнитный момент,  $I_2$  — продольный адиабатический инвариант и  $I_3$  — обобщенный азимутальный импульс) приводят уравнение (1) для быстрых ионов к виду

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \frac{d\phi_k}{dt} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \phi_k} = \sum_{\beta \neq \alpha} \hat{C}^{\alpha/\beta} \{f_\alpha | f_\beta\} + S_\alpha . \quad (3)$$

Взаимодействия, приводящие к превращению частиц, как уже говорилось выше, мы здесь опускаем за исключением ионизации инжектируемых нейтральных атомов, которая приводит к появлению в уравнении источника  $S_\alpha$ .

В результате фазового размешивания функцию распределения  $f_\alpha(t, I_i, \phi_k)$  можно считать почти не зависящей от фаз  $\phi_k$ , то есть

$$f_\alpha(t, I_i, \phi_k) = \bar{f}_\alpha(t, I_i) + \delta f_\alpha(t, I_i, \phi_k) , \quad (4)$$

где поправка  $\delta f_\alpha$  мала по сравнению с усредненной по фазам функцией  $\bar{f}_\alpha(t, I_i)$ . Параметрами малости являются отношения частоты столкновений  $\nu_{col}$  к частотам  $\omega_k = d\phi_k/dt$ . Соответствующее уравнение для усредненной функции запишем в виде

$$\frac{\partial \bar{f}_\alpha}{\partial t} = \sum_{\beta \neq \alpha} \bar{C}^{\alpha/\beta} \{ \bar{f}_\alpha | f_\beta \} + \bar{S}_\alpha . \quad (5)$$

Члены в левой части уравнения (3), содержащие производные по  $\phi_k$ , обрались в ноль в результате усреднения, поскольку частоты  $\omega_k = d\phi_k/dt$  можно считать константами на протяжении периода соответствующих фаз  $\phi_k$ . Отметим, что реальные значения параметров рассматриваемой задачи таковы, что частота азимутального дрейфа  $\omega_3$ , вообще говоря, не является большой, по сравнению с частотой столкновений, поэтому для отбрасывания членов с производными по  $\phi_3$  мы пользуемся аксиальной симметрией задачи.

Явные выражения для используемых переменных в случае аксиально симметричной параксиальной ловушки с плазмой малого давления ( $\beta \ll 1$ ) приведены в Приложении II.

### 4 Масштабирование редуцированного пространства

Приближенные методы аналитического исследования уравнения (1) (см. например [1]) дают нам информацию о локализации функции распределения. Эта информация может быть использована для перенасштабирования пространства переменных с тем, чтобы в новых переменных решение становилось одномасштабной функцией. Для такого преобразования логично использовать функцию "разрешения", которая мала в тех участках фазового пространства, где заведомо мала функция распределения, и поэтому нас не интересует высокая относительная точность решения. Кроме того, для численного решения удобно преобразовать область, в которой ищется решение, к прямоугольному виду.

Если использовать функцию "разрешения" вида  $R = R_{12}(Y_1, Y_2)R_3(Y_3)$ , то следующие выражения определяют преобразование, удовлетворяющее требуемым свойствам

$$X_1(Y_1) = \int_{Y_{1min}}^{Y_1} dy_1 \int_{Y_{2min}}^{Y_{2max}} dy_2 R_{12}(y_1, y_2)/\|R_{12}\| , \quad (6)$$

$$\|R_{12}\| = \int_{Y_{1min}}^{Y_{1max}} dy_1 \int_{Y_{2min}}^{Y_{2max}} dy_2 R_{12}(y_1, y_2) , \quad (7)$$

$$X_2(Y_1, Y_2) = \frac{\int_{Y_{2min}}^{Y_2} dy_2 R_{12}(Y_1, y_2)}{\int_{Y_{2min}}^{Y_{2max}} dy_2 R_{12}(Y_1, y_2)} , \quad (8)$$

$$X_3(Y_3) = \int_{Y_{3min}}^{Y_3} dy_3 R_3(y_3)/\|R_3\| , \quad (9)$$

$$\|R_3\| = \int_{Y_{3\min}}^{Y_{3\max}} dy_3 R_3(y_3) , \quad (10)$$

В частности, для случая инъекции узкого (в смысле разброса по скоростям) пучка ионов в качестве функции "разрешения" можно использовать аналитическое решение приближенного уравнения:

$$R_{12}(Y_1, Y_2) = \frac{v}{(v^3 + v_c^3)\Delta\theta} \left[ \exp - \frac{(Y_3 - \cos\theta_0)^2}{\Delta\theta^2} + C_1 \right] , \quad (11)$$

где  $v = \sqrt{2Y_1/m}$ ,

$$\Delta\theta(Y_1) = \Delta\theta_0 \left[ \frac{v_F^3}{v_c^3} \ln \frac{1 + v_c^3/v^3}{1 + v_F^3/v^3} \right]^{1/2} \quad (12)$$

и

$$R_3(Y_3) = e^{-\frac{Y_3}{\Phi_0}} + C_2 . \quad (13)$$

Параметры  $v_c$ ,  $v_F$ ,  $\theta_0$ ,  $\Delta\theta_0$ ,  $\Phi_0$ ,  $C_1$ ,  $C_2$  должны приблизенно соответствовать параметрам мишени плазмы и параметрам инъекции (см. [1]).

## 5 Аппроксимация коэффициентов кинетического уравнения

После описанных выше преобразований кинетическое уравнение может быть приведено к виду

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial X_i} \left( \bar{\mathcal{F}}_i F - \bar{D}_{ik} \frac{\partial F}{\partial X_k} \right) + \tilde{S} , \quad (14)$$

где  $F = \bar{f}/J$ , а  $J$  есть якобиан преобразования от исходных переменных к переменным  $\mathbf{X} = \{X_1, X_2, X_3\}$ . Для дальнейшего численного решения уравнения коэффициент силы динамического трения  $\bar{\mathcal{F}}_i(\mathbf{X})$  и тензорный коэффициент диффузии  $\bar{D}_{ik}(\mathbf{X})$  аппроксимируются полиномами (например полиномами Чебышева). Это позволяет вычислять рассматриваемые ниже интегральные свертки базисных функций с членами уравнения (14) аналитически.

## 6 Метод наименьших квадратов для кинетического уравнения

Аппроксимируем функцию распределения  $F$  комбинацией линейно независимых базисных функций  $\Psi_{\tilde{k}}$ ,  $\tilde{k} = 1 \div N_\Psi$  (индексы, соответствующие номерам базисных функций, мы будем писать с тильдой и следовать правилу суммирования по повторяющимся верхним – ковариантным и нижним – контравариантным индексам):

$$F(\mathbf{X}, t) \simeq F_{\tilde{k}}(t) \Psi^{\tilde{k}}(\mathbf{X}) . \quad (15)$$

Наилучшим в смысле среднеквадратичного отклонения набором коэффициентов  $F_{\tilde{k}}$  являются коэффициенты

$$F_{\tilde{k}}(t) = G_{\tilde{k}\tilde{l}} F^{\tilde{l}} = G_{\tilde{k}\tilde{l}} F(\mathbf{X}, t) \otimes \Psi^{\tilde{l}}(\mathbf{X}) , \quad (16)$$

где знак  $\otimes$  означает скалярное произведение функций. В качестве скалярного произведения может быть выбран, например, интеграл

$$A \otimes B = \int g(X) A(\mathbf{X}) B(\mathbf{X}) d^3X , \quad (17)$$

где  $g(X)$  — некая положительная функция. (В следующих разделах мы будем пользоваться другими скалярными произведениями, оставляя для выражения (17) название "исходное" скалярное произведение.) Симметричная контравариантная метрическая матрица  $G_{\tilde{k}\tilde{l}}$  в выражении (16), по определению, есть матрица, обратная ковариантной метрической матрице  $G^{\tilde{k}\tilde{l}}$ :

$$G_{\tilde{k}\tilde{l}} G^{\tilde{l}\tilde{m}} = \delta_{\tilde{k}}^{\tilde{m}} , \quad (18)$$

которая, в свою очередь, определяется как скалярное произведение базисных функций

$$G^{\tilde{k}\tilde{l}} = \Psi^{\tilde{k}} \otimes \Psi^{\tilde{l}} . \quad (19)$$

Метрические матрицы, как обычно, определяют связь между объектами с ко- и контравариантными индексами.

Умножая скалярно обе части уравнения (14) на базисные функции  $\Psi_{\tilde{k}}$ , мы получаем систему обыкновенных линейных дифференциальных уравнений на коэффициенты  $F_{\tilde{k}}$

$$\frac{d}{dt} F_{\tilde{k}} = C_{\tilde{k}}^{\tilde{l}} F_{\tilde{l}} + S_{\tilde{k}} , \quad (20)$$

где

$$C_{\tilde{k}}^{\tilde{l}} = -\Psi_{\tilde{k}} \otimes \frac{\partial}{\partial X_i} \left( \bar{F}_i \Psi^{\tilde{l}} - \bar{D}_{ik} \frac{\partial \Psi^{\tilde{l}}}{\partial X_k} \right) \quad \& \quad S_{\tilde{k}} = \Psi_{\tilde{k}} \otimes \tilde{S}$$

Если мы подставим в левую и правую части исходного уравнения (14) разложение (15) и будем искать минимум квадрата (в смысле выбранного скалярного произведения) разности между левой и правой частями, варьируя значения производных  $dF_{\tilde{k}}/dt$ , то этот минимум и будет обеспечиваться решениями системы (20).

Для решения линейной системы уравнений типа (20) существует масса различных численных алгоритмов. Мы пользуемся наиболее полным методом решения такой системы, заключающимся в нахождении собственных значений и собственных векторов "столкновительной" матрицы  $C_{\tilde{k}}^{\tilde{l}}$  и разложении решения по собственным векторам (подробнее см. Приложение III). Это позволяет нам отбраковывать нефизические столкновительные матрицы с положительными собственными значениями, которые могут возникать, например, в результате плохой аппроксимации коэффициентов уравнения (14). В двух следующих разделах мы рассмотрим вопросы, как сделать эту схему консервативной и как учесть граничные условия.

## 7 Консервативное разложение

Как уже отмечалось во введении, существенным требованием к линейному этапу задачи является консервативность схемы. Исходные операторы взаимодействия, в частности оператор  $\hat{C}^{\alpha/\beta} \{ \tilde{f}_\alpha | \tilde{f}_\beta \}$ , точно сохраняют интересующие нас количество частиц и энергии. Однако, в общем случае, описанная выше методика приближенного решения будет выполнять законы сохранения не точнее, чем находить собственно решение. Для того чтобы схема стала консервативной, мы можем изменить способ нахождения коэффициентов в разложении (15). Потребуем, чтобы одновременно с приближенным равенством (15) точно выполнялись равенства

$$\hat{N}^m(F) = F_{\tilde{k}} \hat{N}^m(\Psi^{\tilde{k}}), \quad m = 1, \dots, M, \quad (21)$$

где  $\hat{N}^m$  есть линейные функционалы, значениями которых являются величины, подлежащие точному сохранению (например, количество частиц и энергии соответствующие функции распределения  $F$ ). Количество таких операторов  $M$ , конечно, должно быть меньше, чем число базисных

функций  $N_\Phi$ . Оказывается, что для выполнения такого разложения достаточно ввести новое определение скалярного произведения. Для его построения, во первых, мы должны выбрать некий набор из  $M$  "ведущих" функций  $\Phi^m(X)$ , каждая из которых является некоторой линейной комбинацией базисных функций  $\Psi^{\tilde{k}}(X)$  со следующими свойствами

$$\begin{aligned} \hat{N}^m(\Phi^n) &\neq 0 \quad \text{если} \quad m = n, \\ \hat{N}^m(\Phi^n) &= 0 \quad \text{если} \quad m \neq n. \end{aligned} \quad (22)$$

Теперь определим новое, консервативное скалярное произведение следующим образом

$$\begin{aligned} A \underset{\hat{N}, \Phi}{\otimes} B &\equiv \left[ A - \sum_{m=1}^M \Phi^m \frac{\hat{N}^m(A)}{\hat{N}^m(\Phi^m)} \right] \otimes \left[ B - \sum_{m=1}^M \Phi^m \frac{\hat{N}^m(B)}{\hat{N}^m(\Phi^m)} \right] + \\ &+ \sum_{m=1}^M \frac{\hat{N}^m(A) \cdot \hat{N}^m(B)}{\hat{N}^m(\Phi^m)}. \end{aligned} \quad (23)$$

Нетрудно проверить, что это произведение обладает всеми необходимыми для скалярного произведения свойствами, а именно: коммутативностью, дистрибутивностью по отношению к сложению, не отрицательностью квадрата  $[A]^2 \equiv A \underset{\hat{N}, \Phi}{\otimes} A$ , который равен нулю только при условии, что  $A(X) \equiv 0$  (конечно мы предполагаем, что исходное скалярное произведение  $\otimes$  обладает теми же свойствами).

Основным дополнительным свойством, которым обладает наше консервативное произведение, является то, что для любой функции  $A(X)$

$$\Phi^m \underset{\hat{N}, \Phi}{\otimes} A = \hat{N}^m(A). \quad (24)$$

Теперь, используя некий новый набор функций  $\tilde{\Psi}^{\tilde{k}}(X)$ , являющихся линейно независимыми комбинациями предыдущих базисных функций  $\Psi^{\tilde{k}}(X)$  (в частности, конечно, можно использовать исходные базисные функции  $\tilde{\Psi}^{\tilde{k}} = \Psi^{\tilde{k}}$ ), мы получаем разложение

$$F(X) \simeq \tilde{F}(X) \equiv \tilde{F}_{\tilde{k}} \tilde{\Psi}^{\tilde{k}}(X) = \tilde{F}^{\tilde{k}} \tilde{\Psi}_{\tilde{k}}(X), \quad (25)$$

где

$$\tilde{F}_{\tilde{k}} = \tilde{\Psi}_{\tilde{k}} \underset{\hat{N}, \Phi}{\otimes} f \quad \& \quad \tilde{F}^{\tilde{k}} = \tilde{\Psi}^{\tilde{k}} \underset{\hat{N}, \Phi}{\otimes} f. \quad (26)$$

Здесь связи между объектами с ко- и контравариантными индексами определяются так же, как и в предыдущем разделе, но для определения метрической матрицы используется консервативное скалярное произведение

$$G^{\tilde{k}\tilde{m}} \equiv \tilde{\Psi}^{\tilde{k}} \frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}, \Phi} \tilde{\Psi}^{\tilde{m}} . \quad (27)$$

Не трудно проверить, что разложение (25) точно сохраняет все функционалы  $\hat{\mathcal{N}}^m(\tilde{f}) = \hat{\mathcal{N}}^m(f)$  благодаря свойству (24) и обеспечивает минимум погрешности нашего аппроксимирующего разложения по следующей норме

$$(f - \tilde{F}_{\tilde{k}} \tilde{\Psi}^{\tilde{k}}) \frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}, \Phi} (f - \tilde{F}_{\tilde{k}} \tilde{\Psi}^{\tilde{k}}) . \quad (28)$$

Нам осталось выяснить следующие вопросы: каким образом мы должны выбирать "ведущие" функции  $\Phi^m(X)$  и новый базис  $\tilde{\Psi}^{\tilde{k}}(X)$ ?

Простейший для использования и наилучший для минимизации вычислительных погрешностей путь есть использование ортонормированного (в смысле консервативного произведения) набора базисных функций, включающего в себя "ведущие" функции. Сейчас мы опишем процедуру, как это сделать.

Для начала, давайте построим произвольный набор функций  $\overline{\Psi}^{\tilde{k}}(X)$ , который является ортонормированным в смысле консервативного скалярного произведения. Для этого мы построим сингулярное разложение для положительно определенной симметричной матрицы  $G_0^{\tilde{k}\tilde{m}} \equiv \Psi^{\tilde{k}} \otimes \Psi^{\tilde{m}}$ , которое записывается в виде

$$G_0 = U_0 g_0 U_0^T ,$$

где  $U_0$  ортогональная матрица, а  $g_0$  диагональная матрица. В индексной записи это выглядит следующим образом

$$\Psi^{\tilde{k}} \otimes \Psi^{\tilde{m}} = U_0^{\tilde{k}} \delta^{\tilde{k}\tilde{m}'} U_0^{\tilde{m}'} ,$$

при этом

$$U_0^{\tilde{k}} \delta^{\tilde{k}\tilde{m}'} U_0^{\tilde{m}'} = \delta^{\tilde{k}\tilde{m}}$$

и

$$g_0^{\tilde{k}\tilde{m}} = 0, \text{ если } \tilde{k} \neq \tilde{m} ,$$

$$g_0^{\tilde{k}\tilde{m}} > 0, \text{ если } \tilde{k} = \tilde{m} .$$

(Заметим, что  $\delta^{\tilde{k}\tilde{m}}$  есть диагональная матрица с единичными диагональными элементами, но она не является инвариантной по отношению к произвольным линейным преобразованиям, в отличии от символа Кронекера  $\delta_{\tilde{m}}^{\tilde{k}}$ .)

Теперь, используя матрицы  $U_0$  и  $g_0$ , мы получаем набор

$$\overline{\Psi}^{\tilde{k}} = \Psi^{\tilde{m}} \delta_{\tilde{m}\tilde{m}'} U_0^{\tilde{m}'} \frac{\delta^{\tilde{k}'\tilde{k}}}{\sqrt{g_0^{\tilde{k}\tilde{k}}} \quad (29)}$$

(не суммировать по индексу  $\tilde{k}$ ).

На следующем этапе мы должны построить SVD разложение для прямоугольной матрицы  $\mathcal{N}^{m,\tilde{k}} \equiv \hat{\mathcal{N}}^m(\overline{\Psi}^{\tilde{k}})$ , которое определяется как

$$\mathcal{N} = U \eta V^T ,$$

где  $U$  и  $V$  ортогональные матрицы, а  $\eta$  есть прямоугольная диагональная матрица (матрицы  $\mathcal{N}$  и  $\eta$  не являются квадратными, поскольку  $M < N_\Psi$ ). В индексной записи это выглядит следующим образом

$$\mathcal{N}^{m,\tilde{k}} = U_m^m \eta^{m',\tilde{k}'} V_{\tilde{k}'}^{\tilde{k}} , \quad (30)$$

или символически

$$\left( \begin{array}{c|cc} \mathcal{N} & & \\ \hline & U & \eta & V^T \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c|cc} & & \\ \hline U & & \eta & V^T \end{array} \right) \left( \begin{array}{c|cc} & & \\ \hline & & V^T \end{array} \right) .$$

В качестве "ведущих" функций выберем следующие

$$\Phi^m = \sum_{m'=1}^M U_m^m \frac{1}{\eta^{m',m'}} V_{m'}^{\tilde{k}'} \delta_{\tilde{k}'\tilde{k}} \overline{\Psi}^{\tilde{k}} \quad (31)$$

Заметим, что

$$\hat{\mathcal{N}}^m(\Phi^l) = \delta^{ml}$$

в соответствии с (22).

(Доказательство:

$$\hat{\mathcal{N}}^m(\Phi^l) = \sum_{l'=1}^L U_l^l \frac{1}{\eta^{l',l}} V_{l'}^{\tilde{k}'} \delta_{\tilde{k}'\tilde{k}} \hat{\mathcal{N}}^m(\overline{\Psi}^{\tilde{k}}) =$$

$$= \sum_{l'=1}^M U^l{}_{l'} \frac{1}{\eta^{l', l}} V^{\tilde{k}'}{}_{l'} \delta_{\tilde{k}' \tilde{k}} V^{\tilde{k}}{}_{\tilde{k}''} \eta^{m', \tilde{k}''} U^m{}_{m'} = \delta^{ml} ,$$

что и требовалось доказать.)

Второе свойство:

$$\Phi^m \frac{\otimes}{\hat{N}, \Phi} V^{\tilde{l}}{}_{\tilde{k}} \delta_{\tilde{l}\tilde{l}'} \bar{\Psi}^{\tilde{l}'} = 0, \quad \text{если } \tilde{k} > M .$$

(Доказательство: благодаря свойству (24) "ведущих" функций  $\Phi^m$  получаем

$$\begin{aligned} \Phi^m \frac{\otimes}{\hat{N}, \Phi} V^{\tilde{l}}{}_{\tilde{k}} \delta_{\tilde{l}\tilde{l}'} \bar{\Psi}^{\tilde{l}'} &= V^{\tilde{l}}{}_{\tilde{k}} \delta_{\tilde{l}\tilde{l}'} \mathcal{N}^{m', \tilde{l}'} = \\ &= V^{\tilde{l}}{}_{\tilde{k}} \delta_{\tilde{l}\tilde{l}'} U^m{}_{m'} \eta^{m', \tilde{k}'} V^{\tilde{l}'}{}_{\tilde{k}'} = U^m{}_{m'} \eta^{m', \tilde{k}'} \delta_{\tilde{k}' \tilde{k}} = 0, \quad \text{если } \tilde{k} > M , \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.)

Таким образом, набор

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}^{\tilde{k}} &= \Phi^{\tilde{k}}, \quad \text{если } \tilde{k} \leq M \quad \text{и} \\ \tilde{\Psi}^{\tilde{k}} &= \delta^{\tilde{k}\tilde{k}'} V^{\tilde{l}'}{}_{\tilde{k}'}, \quad \text{если } \tilde{k} > M \end{aligned} \quad (32)$$

может быть использован, как ортонормированный (в смысле консервативного произведения) базис.

## 8 Линейная дифференциальная задача с граничными условиями

Здесь мы обсудим способ решения задачи Каши для линейного уравнения

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \hat{\mathcal{L}}^{(P)} f + S , \quad (33)$$

для функции  $f(t, x_1, x_2, \dots, x_N)$  (или короче  $f(t, x)$ ) в  $N$ -мерной прямоугольной области  $\mathcal{X}_v$  с дифференциальным оператором

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}^{(P)} &= L(x) + L_n(x) \frac{\partial}{\partial x_n} + \dots + \\ &+ L_{n_1, n_2, \dots, n_P}(x) \frac{\partial}{\partial x_{n_1}} \frac{\partial}{\partial x_{n_2}} \dots \frac{\partial}{\partial x_{n_P}} , \end{aligned} \quad (34)$$

источником  $S(t, x)$ , начальным значением  $f(t_0, x) = f_0(x)$  и набором из  $P$  граничных условий, заданных на  $(N - 1)$ -мерных гранях  $\mathcal{X}_s^n$ :

$$\hat{\mathcal{B}}_p f \Big|_{x \in \mathcal{X}_s^n} = b_p(t, x), \quad p = 1, \dots, P . \quad (35)$$

Мы ограничимся случаем, когда каждая  $(N - 1)$ -мерная грань  $\mathcal{X}_s^n$ , на которой задано одно или несколько граничных условий вида (35), в свою очередь граничит только с гранями, на которых либо не заданы граничные условия, либо задано нулевое граничное условие. (В принципе, рассматриваемая методика может быть обобщена на произвольный способ задания линейных граничных условий.)

Мы хотим найти приближенное решение поставленной задачи и при этом точно сохранить консервативные соотношения, которые представим в виде

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathcal{N}}_{c,m}(f) = \hat{\mathcal{N}}_{c,m}(S) + \hat{\mathcal{N}}_{v,m}(f) + \hat{\mathcal{N}}_{s,m}(f) , \quad (36)$$

где  $\hat{\mathcal{N}}_{c,m}$  — интегральные функционалы, действующие в объеме  $\mathcal{X}_v$ ,  $m = 1 \div M$  и определяющие сохраняемые величины,  $\hat{\mathcal{N}}_{v,m}$  — интегральные функционалы, действующие в объеме  $\mathcal{X}_v$  и определяющие потерю (или рождение) сохраняемых величин в объеме (некоторые из них могут быть тождественно нулевыми),  $\hat{\mathcal{N}}_{s,m}$  — интегральные функционалы, действующие на гранях  $\mathcal{X}_s^n$  и описывающие приток (или отток) сохраняемых величин через поверхность.

Выберем базисные функции в виде

$$\Psi^{\tilde{k}}(x) = \prod_{n=1}^N \psi^{\tilde{k}_n}(x_n) , \quad (37)$$

где каждому набору индексов  $\tilde{k}_1, \tilde{k}_2, \dots, \tilde{k}_N$  соответствует свое значение  $\tilde{k}$ . Индексы  $\tilde{k}_n$  меняются от 1 до  $N_{\psi,n}$ . Очевидно, что  $\prod_{n=1}^N N_{\psi,n} = N_{\Psi}$ . (Заметим, что выбор базисных функций в виде (37), существенно сокращает время вычисления метрических матриц.) Путем выбора соответствующих  $\psi^{\tilde{k}_i}$  легко удовлетворить условию зануления базисных функций на тех гранях, на которых заданы нулевые граничные условия. Естественный базис для каждой грани с  $x_n = \text{const}$  образуют функции  $\Psi^{n, \tilde{k}}(x) = \prod_{i \neq n} \psi^{\tilde{k}_i}(x_i)$ .

Далее, кроме обычного исходного "объемного" скалярного произведения

$$a \otimes b \equiv \int_{x \in \mathcal{X}_v} a(x) g(x) b(x) d^N x , \quad (38)$$

мы определим исходные "поверхностные" произведения:

$$a \otimes_n b \equiv \int_{x \in \mathcal{X}_s^n} a(x) g_n(x) b(x) d^{N-1}x . \quad (39)$$

Затем построим по рецепту, описанному в предыдущем разделе, поверхностные скалярные произведения  $\frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_s, \Phi_s, n}$ , которые при разложении функций на грани  $\mathcal{X}_s^n$  будут сохранять значения  $\hat{\mathcal{N}}_{s,m}$ .

Наконец, определим "объемное" консервативное скалярное произведение  $\frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_\sigma, \Phi_\sigma}$ , сохраняющее значения набора функционалов  $\hat{\mathcal{N}}_{\sigma,r}$ , включающего в себя функционалы  $\hat{\mathcal{N}}_{c,m}$ , не равные тождественно нулю функционалы  $\hat{\mathcal{N}}_{v,m}$ , и необходимые для выполнения граничных условий функционалы  $\hat{\mathcal{N}}_b^{p,\tilde{k}}$ , действие которых определяется следующим выражением

$$\hat{\mathcal{N}}_b^{p,\tilde{k}}(f) = \Psi^{n_p, \tilde{k}} \frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_s, \Phi_s, n_p} \hat{B}_p f . \quad (40)$$

Количество функционалов  $\hat{\mathcal{N}}_b^{p,\tilde{k}}$ , очевидно, равно

$$N_b = \sum_{p=1}^P \prod_{i \neq n_p}^N N_{\psi,i} .$$

Будем считать, что каждому значению индекса  $\tilde{n} = 1 \div N_b$  соответствуют в (40) свои значения индексов  $\tilde{k}$ ,  $p$  и, очевидно,  $n_p$ , обозначаемые далее, как  $\tilde{k}_{\tilde{n}}$ ,  $p_{\tilde{n}}$  и  $n_{\tilde{n}}$ .

Теперь, пользуясь технологией, описанной в предыдущем разделе, построим новый базис  $\tilde{\Psi}^{\tilde{k}}$ , включающий в себя "ведущие" функции для всего набора функционалов  $\hat{\mathcal{N}}_{\sigma,r}$  и, в частности,  $N_b$  "ведущих" функций  $\Phi_\sigma^{n_b}$ , соответствующих функционалам  $\hat{\mathcal{N}}_b^{p,\tilde{k}}$ . Для определенности будем считать, что  $\Phi_\sigma^{n_b}$  являются первыми  $N_b$  элементами упорядоченного базиса  $\tilde{\Psi}^{\tilde{k}}$ . Используя остальные  $N_\Psi - N_b$  элемента этого базиса и консервативное произведение  $\frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_\sigma, \Phi_\sigma}$ , так же, как и в 6-ом разделе, получим систему из  $N_\Psi - N_b$  уравнений на коэффициенты разложения искомого решения

$$\frac{d}{dt} \tilde{f}_{\tilde{k}} = C_{\tilde{k}}^{\tilde{l}} \tilde{f}_{\tilde{l}} + S_{\tilde{k}}, \quad N_\Psi - N_b \leq \tilde{k} \leq N_\Psi \quad (41)$$

(суммирование по индексу  $\tilde{l}$  выполняется по всему базису, то есть от 1 до  $N_\Psi$ ), где

$$C_{\tilde{k}}^{\tilde{l}} = \tilde{\Psi}_{\tilde{k}} \frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_\sigma, \Phi_\sigma} \hat{\mathcal{L}}^{(P)} \tilde{\Psi}^{\tilde{l}} \quad \& \quad S_{\tilde{k}} = \tilde{\Psi}_{\tilde{k}} \frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_\sigma, \Phi_\sigma} S .$$

Систему (41) мы должны решать, стартуя с начальных значений

$$\tilde{f}_{\tilde{k}} = \tilde{\Psi}_{\tilde{k}} \frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_\sigma, \Phi_\sigma} f_0(x) .$$

Для определения оставшихся  $N_b$  коэффициентов воспользуемся граничными условиями, полагая

$$\tilde{f}_{\tilde{n}}(t) = \Psi^{n_{\tilde{n}}, \tilde{l}_{\tilde{n}}} \frac{\otimes}{\hat{\mathcal{N}}_s, \Phi_s, n_{\tilde{n}}} b_{p_{\tilde{n}}}(t, x), \quad \tilde{n} \leq N_b . \quad (42)$$

Нетрудно убедиться, что решение  $\tilde{f}(t, x) \equiv \tilde{f}_{\tilde{k}}(t) \tilde{\Psi}^{\tilde{k}}(x)$  будет минимизировать среднеквадратичное отклонение от заданных начальных данных, граничных условий и минимизировать (при варьировании  $d\tilde{f}_{\tilde{k}}/dt$ ) среднеквадратичную разницу между левой и правой частями исходного уравнения (33). Поскольку консервативные соотношения (36) точно удовлетворяются любым точным решением уравнения (33), что можно записать, как

$$\hat{\mathcal{N}}_{c,m} \hat{\mathcal{L}}^{(P)} f \equiv \hat{\mathcal{N}}_{v,m}(f) + \hat{\mathcal{N}}_{s,m}(f) ,$$

и благодаря свойству консервативного произведения (24), найденное приближенное решение  $\tilde{f}$  так же, как и  $f$ , будет точно удовлетворять соотношениям (36).

## 9 Описание численного кода

В соответствии с рассмотренной в трех предыдущих разделах методикой был создан код для решения в пространстве произвольной размерности  $N$  уравнения вида

$$\frac{df}{dt} = P_0 f + P_{1,i} \frac{\partial f}{\partial X_i} + P_{2,ik} \frac{\partial^2 f}{\partial X_i \partial X_k} + P_{3,ikl} \frac{\partial^3 f}{\partial X_i \partial X_k \partial X_l} + \dots + S(X, t) , \quad (43)$$

где коэффициентами перед производными являются полиномы

$$P_{...} = \pi_0 + \pi_i X_i + \pi_{ik} X_i X_k + \pi_{ikl} X_i X_k X_l + \dots$$

с постоянными коэффициентами, а источник

$$S_{...} = s_0(t) + s_i(t) X_i + s_{ik}(t) X_i X_k + s_{ikl}(t) X_i X_k X_l + \dots$$

есть полином с коэффициентами, являющимися полиномами от времени.

Решение ищется в  $N$ -мерном кубе  $0 \leq X_i \leq 1$ , на одной из  $(N - 1)$ -мерной грани которого может быть задано какое-то количество граничных условий вида (35), где операторы  $\hat{B}_p$ , аналогично оператору в правой части (43), являются дифференциальными операторами с полиномиальными коэффициентами, зависящими от координат на этой поверхности. Соответствующие функции  $b_p(t, X)$  также являются полиномами от координат и времени. На остальных гранях  $N$ -мерного куба может быть задано только нулевое граничное условие (то есть  $f(X)|_{X \in \partial X^p} = 0$ ), либо никакого. Начальное условие также задается в виде полинома. Пользователь может потребовать точного выполнения любого числа консервативных соотношений вида (36) с входящими в соотношения функционалами, имеющими вид

$$\hat{N}_{c,m}(f) = \int_0^1 \hat{\eta}_{c,m}(f) d^N X, \quad \hat{N}_{v,m}(f) = \int_0^1 \hat{\eta}_{v,m}(f) d^N X,$$

$$\hat{N}_{s,m}(f) = \sum_i \int_0^1 \hat{\eta}_{s,m,i}(f) d^{N-1} X, \quad (44)$$

где операторы  $\hat{\eta}$  суть дифференциальные операторы с полиномиальными коэффициентами, а суммирование в последнем выражении производится по всем граням  $N$ -мерного куба.

Для определения "исходных" скалярных произведений в программах используется Чебышевская метрика  $g_c$  для отрезка  $(0, 1)$ :

$$g(X_1, X_2, \dots, X_N) = g_c(X_1) g_c(X_2) \dots g_c(X_N),$$

где

$$g_c(x) = \frac{1}{\sqrt{x(1-x)}},$$

однако требуются относительно небольшие усилия для того, чтобы переориентировать код на любую другую метрику по любой из координат.

Пользователь в исходных файлах определяет коэффициенты в упомянутых выше полиномах, а также максимальные степени полиномов (индивидуально для каждой из координат), в виде которых ищется решение. Конечно, если конкретная реализация описанной выше задачи является некорректной, или, если ее точные решения не удовлетворяют используемым консервативным соотношениям, то полученное решение может не

иметь ничего общего с истинным решением задачи (если оно вообще существует), или код может выдать диагностику о сбое. В противном случае, с ростом максимальных степеней в искомых полиномах, полученные решения должны приближаться к точным до тех пор, пока машинной точности при вычислении коэффициентов матриц будет достаточно. Реально величина максимальных степеней может также ограничиваться ресурсами памяти компьютера.

Код реализован в виде набора программ, которые получают исходную информацию из файлов в Ascii кодах, подготовленных пользователем обычным редактором или пользовательской программой. Обмен промежуточной информацией и выдача результатов также происходит через файлы в Ascii кодах. В случае диагностирования недостаточного размера массивов, необходимо пересобрать пакет программ с указанием в головных модулях больших значений параметров, определяющих размеры массивов.

## 10 Решение модельной задачи

После тестирования на простых уравнениях математической физики код был применен к решению задачи о функции распределения быстрых ионов в том виде, в котором она сформулирована в [1], плюс, с использованием процедур пересаскивания пространства и полиномиальной аппроксимации коэффициентов. Решалось уравнение для функции распределения быстрых ионов  $f(x, \theta, \tau)$ :

$$\frac{df}{d\tau} = \frac{\partial}{\partial x}(x + c)f + \frac{\nu}{x} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}, \quad (45)$$

где  $\tau = t/\tau_{drag}$  — время, нормированное на время торможения,  $x = v^3$  — куб модуля скорости ионов,  $\theta$  — питч-угол,  $c = v_c^3$  — куб скорости, при которой торможение на электронах сравнивается с торможением на ионах мишени,  $\nu = \tau_{drag}/\tau_{ii}$  — отношение времени торможения на электронах, ко времени рассеяния на ионах. Границное условие соответствовало инжекции узкого, по питч-углу, гауссовского пучка ионов при  $x = x_{max}$ .

После преобразования координат

$$X_1(x) = \frac{x - x_0}{x_{max} - x_0}, \quad X_2(x, \theta) = \frac{\theta_{min}}{\pi/2 - \theta_{min}} \int_{\theta_{min}}^{\theta} R(x, \theta) d\theta,$$

где функция "разрешения", позволяющая выделить область сосредоточения ионов при их инжекции с малым угловым разбросом порядка  $\Delta_0$ , была выбрана в виде

$$R(x, \theta) = \frac{1}{y^2 + \alpha_1 \exp(y)}, \quad y = \frac{\theta - \theta_0}{\alpha_2 \Delta(x)}, \quad \Delta(x) = \sqrt{\Delta_0^2 + 4\nu \left( \frac{x_{max}}{x} - 1 \right)},$$

уравнение (45) переходит в следующее

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{d\tau} &= \frac{\partial}{\partial X_1} [(X_1 + c_1)\Phi] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial X_2} \left\{ \left[ (X_1 + c_1)A + \frac{1}{2} \frac{\partial D}{\partial X_2} \right] \Phi + D \frac{\partial \Phi}{\partial X_2} \right\}, \end{aligned} \quad (46)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{f}{\partial X_2 / \partial \theta}, \\ c_1 &= \frac{c + x_0}{x_{max} - x_0}, \quad A = (x_{max} - x_0) \frac{\partial X_2}{\partial x} \\ D &= \frac{\nu}{(x_{max} - x_0)X_1 + x_0} \left( \frac{\partial X_2}{\partial \theta} \right)^2. \end{aligned}$$

и

Коэффициенты в уравнении (46) аппроксимировались двухмерными полиномами и решалась задача с требованием точного сохранения числа частиц (то есть требовалось, чтобы изменение двумерного интеграла по координатам от  $f$  было точно равно количеству инжектируемых частиц, минус количество ионов, ушедших через границу конуса потерь).

Наличие аналитического решения позволяло контролировать точность решения. На рис.1 и рис.2 приведены графики полученных функций распределения быстрых ионов в центральном сечении ловушки в момент времени  $t = \tau_{drag}/3$  с начала инжекции и после установления стационара, соответственно.

На рис.3 представлен график стационарной функции распределения в сечении, соответствующем точке остановки инжектируемых ионов.

Среднеквадратичное отклонение представленных решений от точных составляло  $\sim 0.7$  процента. Полное время расчета данного варианта, включающее время всех предварительных процедур, было  $\sim 10$  мин для РС-486.

Естественным "трудным местом" для кода оказалась область начала координат, где, в силу постановки задачи, коэффициент диффузии имеет

особенность  $\sim 1/v^3$  (в варианте решения, представленном на рисунках, значение параметра  $x_0$  бралось равным  $x_{max}/10$ , "дыра" в функции распределения в начале координат соответствует меньшим значениям  $v^3$ ). Дальнейшая модификация кода, разрешающая присутствие в полиномиальных коэффициентах членов с отрицательными степенями, должна позволить разрешить эту проблему.

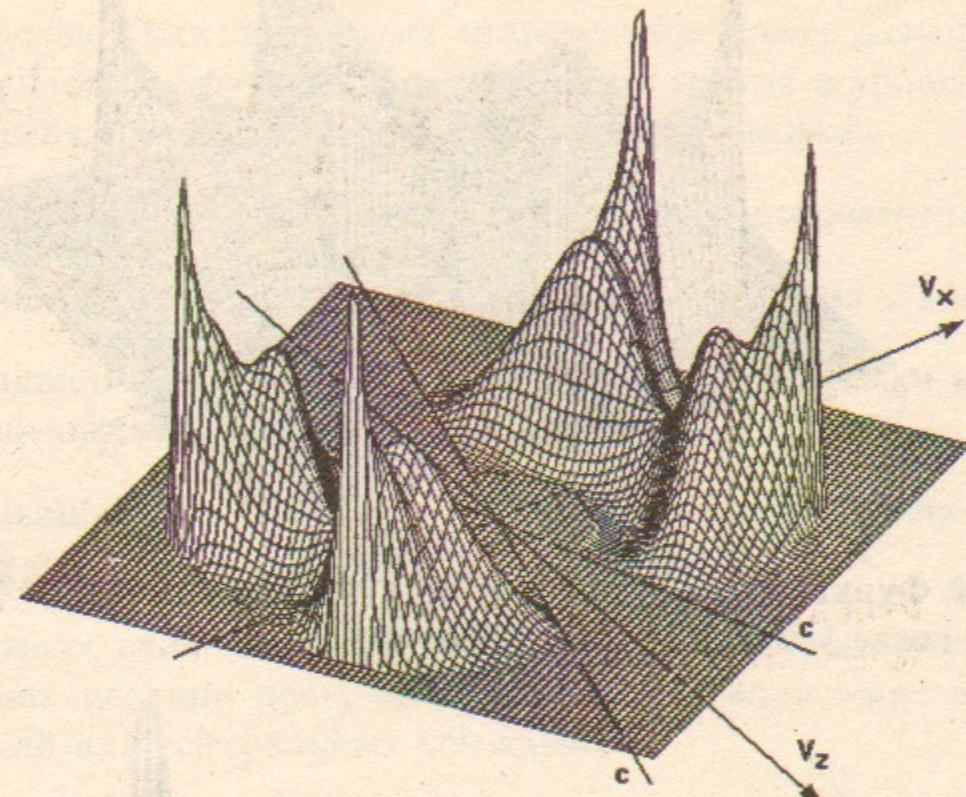


Рис. 1. Функция распределения быстрых ионов в центральном сечении ловушки в момент времени  $t = \tau_{drag}/3$  с начала инжекции. Линии, отмеченные буквой "с", показывают границы конуса потерь.

## 11 Заключение

В настоящей работе представлено описание лишь первого этапа по созданию методики решения задачи о функции распределения частиц в ловушках типа "Водородный прототип" и "Генератор нейтронов". Для получения законченной методики необходимы еще следующие этапы:

- Создание кода для вычисления аппроксимирующего разложения коэффициентов диффузии и динамического трения в уравнении (14) для мишени с неоднородной максвелловской плазмой.
- То же для мишени с произвольной функцией распределения.
- Модификация системы координат типа (54 — 60) для задач с  $\beta \sim 1$ .
- Модификация описанного кода, допускающая физически оправданные особенности в коэффициентах диффузии.
- Модификация кода, позволяющая решать систему уравнений типа (43) для работы с многокомпонентной плазмой.
- Полноценное включение в кинетические уравнения операторов, описывающих реакции превращения частиц, и включение в систему уравнений для нейтральных компонент.
- Создание эффективного МГД-кода для описания поведения "холодных" компонент плазмы.
- Создание итерационной процедуры для решения нелинейной задачи.

## Благодарности

Автор признателен И.А. Котельникову и В.Н. Худику за плодотворные дискуссии.

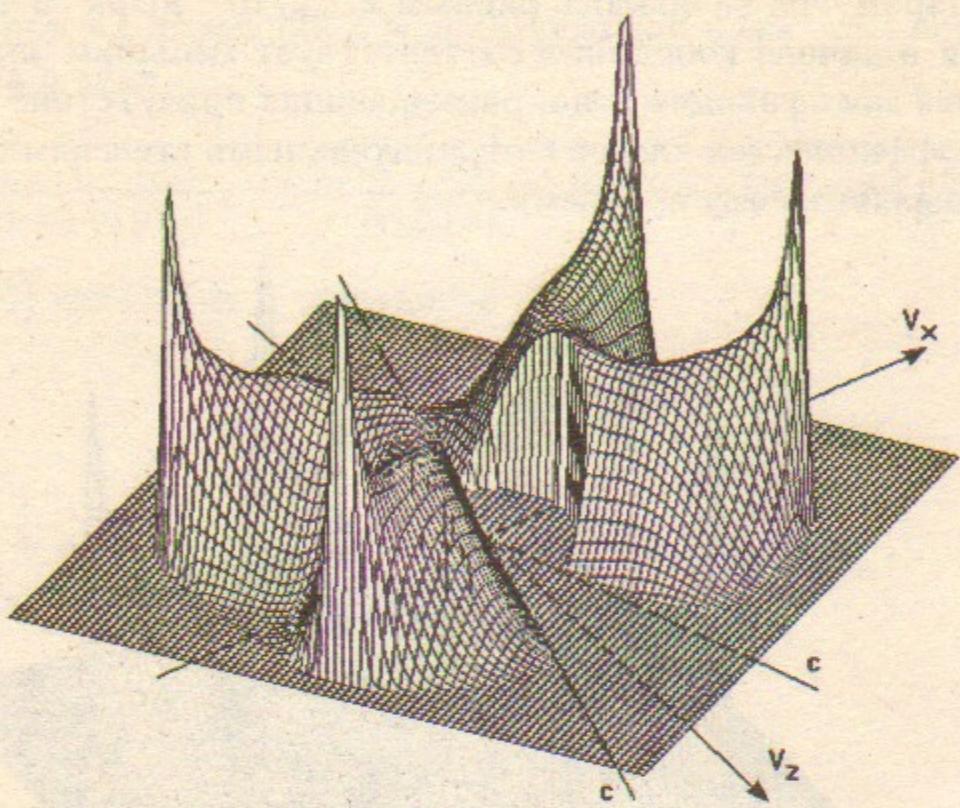


Рис. 2. Функция распределения быстрых ионов в центральном сечении ловушки после установления стационара.

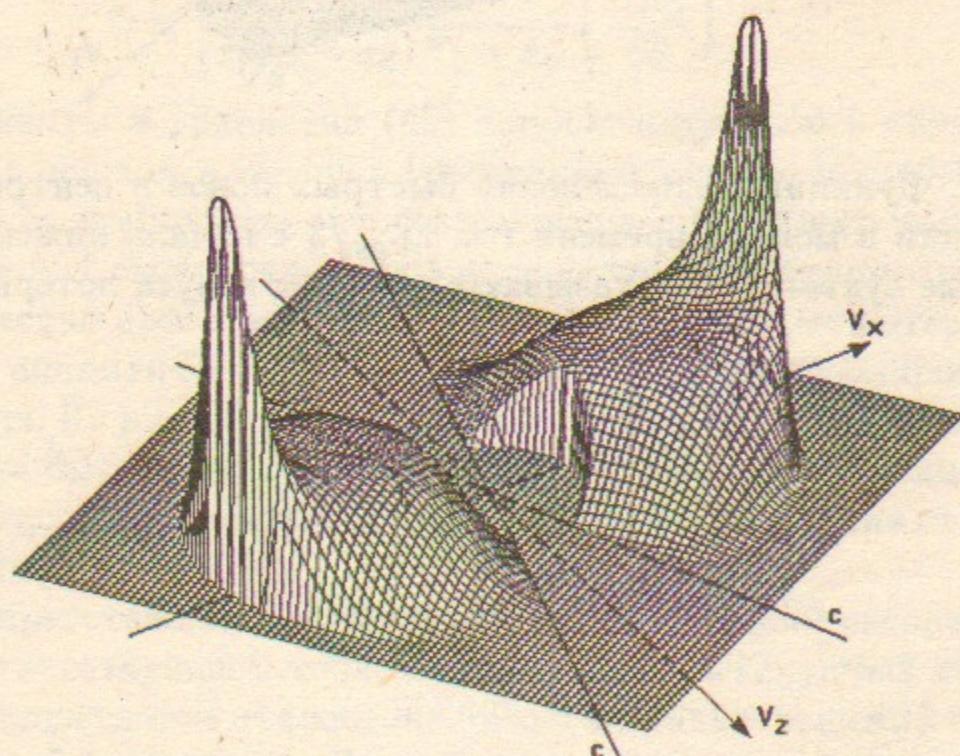


Рис. 3. Стационарная функция распределения быстрых ионов в сечении, соответствующем точке остановки инжектируемых ионов.

## Приложение I

Коэффициенты в кулоновском столкновительном операторе (2) могут быть записаны в следующей форме [4]: коэффициент силы динамического трения  $\mathcal{F}$  равен

$$\mathcal{F}_i^{\alpha/\beta} = \frac{m_\alpha^2}{m_\beta} \frac{\partial}{\partial v_{\alpha,k}} D_{ik}^{\alpha/\beta}, \quad (47)$$

тензорный коэффициент диффузии  $D$  определяется как

$$D_{ik}^{\alpha/\beta} = -L^{\alpha/\beta} \frac{\partial^2 \psi_\beta}{\partial v_{\alpha,i} \partial v_{\alpha,k}} \quad (48)$$

и потенциалы Розенблюта-Трубникова есть

$$\psi_\beta(\mathbf{v}) \equiv -\frac{1}{8\pi} \int |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| \tilde{f}_\beta(\mathbf{v}') d^3 v' \quad (49)$$

Коэффициенты  $L^{\alpha/\beta}$  в (48) равны

$$L^{\alpha/\beta} \equiv \Lambda^{\alpha/\beta} (4\pi e_\alpha e_\beta / m_\alpha)^2,$$

а кулоновские логарифмы могут быть записаны в форме

$$\Lambda^{\alpha/\beta} \simeq \frac{1}{4} \sum_{\gamma=\alpha,\beta} \ln \frac{W_\gamma^3}{3\pi n_\gamma e_\gamma^6},$$

где  $W_\gamma$  и  $n_\gamma$  — характерные энергии и плотности соответствующих компонент плазмы.

Для максвелловской мишениной плазмы с температурой  $T_\beta$  и плотностью  $n_\beta$  кулоновский столкновительный оператор в сферических координатах  $\mathbf{v}_\alpha = (v, \theta, \phi)$  имеет вид [2]

$$\hat{\mathcal{C}}^{\alpha/\beta} \{\tilde{f}_\alpha | \tilde{f}_\beta\} = -\frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} v^2 \left[ \frac{1}{m_\alpha} \mathcal{F}_v^{\alpha/\beta} \tilde{f}_\alpha - D_v^{\alpha/\beta} \frac{\partial \tilde{f}_\alpha}{\partial v} \right] + D_\theta^{\alpha/\beta} \Delta_\theta \tilde{f}_\alpha, \quad (50)$$

где оператор  $\Delta_\theta$  есть угловая часть лапласиана

$$\Delta_\theta \tilde{f} = \frac{1}{v^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{v^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial \phi^2}.$$

Сила динамического трения в этом случае направлена вдоль вектора скорости  $v_\alpha$ , и ее величина равна

$$\mathcal{F}_v^{\alpha/\beta} = -\frac{L^{\alpha/\beta} m_\alpha^2}{8\pi} \frac{n_\beta}{T_\beta} A \left( \sqrt{\frac{m_\beta v^2}{2T_\beta}} \right), \quad (51)$$

где функция

$$A(x) \equiv \frac{\operatorname{erf}(x)}{x^2} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\exp(-x^2)}{x}.$$

Отметим, что при  $x \ll 1$  функция  $A(x)$  имеет регулярную асимптотику  $A(x) \simeq \frac{4}{3\sqrt{\pi}} x$ .

"Радиальный" коэффициент диффузии в (50) равен

$$D_v^{\alpha/\beta} = \frac{L^{\alpha/\beta}}{8\pi} \frac{n_\beta}{v} A \left( \sqrt{\frac{m_\beta v^2}{2T_\beta}} \right), \quad (52)$$

а "угловой" коэффициент диффузии определяется выражением

$$D_\theta^{\alpha/\beta} = \frac{L^{\alpha/\beta}}{8\pi} n_\beta \sqrt{\frac{m_\beta}{2T_\beta}} C \left( \sqrt{\frac{m_\beta v^2}{2T_\beta}} \right), \quad (53)$$

где функция

$$C(x) \equiv \left( 1 - \frac{1}{2x^2} \right) \frac{\operatorname{erf}(x)}{x} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\exp(-x^2)}{x^2}.$$

Отметим, что при малых значениях аргумента  $C(x) \simeq \frac{4}{3\sqrt{\pi}}$ .

## Приложение II

В случае аксиально симметричной параксиальной ловушки с плазмой малого давления ( $\beta \ll 1$ ) в качестве переменных для усредненной функции распределения быстрых ионов  $\tilde{f}$  удобно выбирать определяемые ниже переменные  $Y_1, Y_2, Y_3$ , выражющиеся явно через адиабат-инварианты  $I_k$ :

$$Y_1 = \epsilon = \frac{mv^2}{2} + e\varphi, \quad (54)$$

где  $\varphi$  — электростатический потенциал, как функция координат;

$$Y_2 = \frac{\epsilon_\perp}{\omega_{Bi}\epsilon} = \frac{mv_\perp^2}{2\omega_{Bi}\epsilon}, \quad (55)$$

где  $\omega_{Bi} = \frac{eB}{mc}$  — ионно-циклотронная частота,  $B$  — магнитное поле, как функция координат;

$$Y_3 = \frac{e\Phi_c}{2\pi mc} = \frac{r_c^2 \omega_{Bi}}{2}, \quad (56)$$

где  $r_c$  радиус положения центра лармировской окружности.

Фазовые переменные  $\phi_k$  связаны с декартовыми координатами следующими соотношениями:

$$\phi_1 = \omega_{||} \int_{s_1}^s \frac{ds}{v_{||}} \Big|_{Y_1, Y_2 = const} \quad (57)$$

— фаза баунс движений, где

$$\omega_{||} = \pi \left[ \int_{s_1}^{s_2} \frac{ds}{v_{||}} \right]^{-1} \quad (58)$$

— баунс частота,  $v_{||}^2 = \frac{2}{m} [\epsilon(1 - \omega_{Bi} Y_2) - e\varphi]$  — продольная скорость ионов,  $s_1$  и  $s_2$  точки поворота, где  $v_{||} = 0$ ;

$$\phi_2 = \arctan(v_y/v_x) \quad (59)$$

— фаза лармировского вращения;

$$\phi_3 = \arctan(y_c/x_c) \quad (60)$$

— азимутальный угол положения лармировского центра.

### Приложение III

Для решения векторного уравнения

$$\frac{d\mathbf{f}}{dt} = \hat{\mathcal{M}}\mathbf{f} + \mathbf{s}(t), \quad (61)$$

где вектор  $\mathbf{f}$  есть  $N$  функций от  $t$ :  $f_j(t)$ ,  $j = 1 \dots N$ , а вектор источника  $\mathbf{s}$  есть  $N$  заданных функций  $s_j(t)$ , давайте сначала найдем собственные значения и собственные вектора матрицы  $\hat{\mathcal{M}} \equiv \mathcal{M}_j^k$ . Теперь мы имеем

$$\hat{\mathcal{M}}\mathbf{v}^k = \mu^k \mathbf{v}^k \quad (62)$$

(не суммировать по индексу  $k$ ),  
где  $\mathbf{v}^k$  есть  $N$  комплексных собственных векторов:  $v_j^k$ , то есть

$$\mathcal{M}_l^j v_j^k = \mu_l^j v_j^k,$$

где  $\mu_l^j$  — диагональная матрица с комплексными собственными значениями на диагонали.

Теперь, используя разложение начального вектора  $\mathbf{f}_0 \equiv f_j(t)|_{t=0}$  и вектора источника  $\mathbf{s}(t)$  по собственным векторам

$$\mathbf{f}_0 = F_{0k} \mathbf{v}^k, \quad \mathbf{s} = S_k(t) \mathbf{v}^k, \quad (63)$$

мы получаем решение уравнения (61) в виде

$$\mathbf{f}(t) = F_k(t) \mathbf{v}^k, \quad (64)$$

где

$$F_k(t) = \exp(\mu^k t) \left[ F_{0k} + \int_0^t dt' \exp(-\mu^k t') S_k(t') \right] \quad (65)$$

(не суммировать по индексу  $k$ ).

Заметим, что в общем случае пространство собственных векторов может иметь размерность ниже исходной, тогда, кроме экспоненциальных зависимостей от времени, решение однородного уравнения может содержать и члены со степенной зависимостью. Однако в нашей "диффузионной" задаче такие решения невозможны и поэтому мы здесь не рассматриваем этот случай. (Вырождение пространства собственных векторов при решении нашей задачи может возникнуть только в случае плохой аппроксимации коэффициентов в уравнении (14).)

Если вектор источника  $\mathbf{s} = const$ , последнее выражение может быть представлено в виде

$$F_k(t) = \exp(\mu^k t) F_{0k} + \frac{\exp(\mu^k t) - 1}{\mu^k} S_k \quad (66)$$

(не суммировать по индексу  $k$ ).

Для действительной матрицы  $\hat{\mathcal{M}}$ , благодаря сопряженности пар комплексных собственных значений и собственных векторов, на практике

более удобно вместо комплексных векторов  $\mathbf{v}^k$  использовать действительные векторы  $\tilde{\mathbf{v}}^k$ , определяемые следующими выражениями

$$\tilde{v}_j^k = v_j^k, \text{ если } \operatorname{Im}(\mu^k) = 0;$$

$$\tilde{v}_j^k = \operatorname{Re} v_j^k \text{ если } \operatorname{Im}(\mu^k) \neq 0 \text{ & } \mu^k = \mu^{*k+1}$$

и

$$\tilde{v}_j^k = \operatorname{Im}(v_j^{k-1}) \text{ если } \operatorname{Im}(\mu^k) \neq 0 \text{ & } \mu^{k-1} = \mu^{*k}.$$

В этих обозначениях решение уравнения (61) представляется как

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(t) = & \sum_k^{\operatorname{Im}(\mu^k)=0} \tilde{\mathbf{v}}^k \exp(\mu^k t) \left[ \tilde{F}_{0k} + \int_0^t dt' \exp(-\mu^k t') \tilde{S}_k(t') \right] + \\ & + \sum_k^{\operatorname{Im}(\mu^k) \neq 0 \text{ & } \mu^{k+1} = \mu^{*k}} \operatorname{Re} \left\{ (\tilde{\mathbf{v}}^k + i\tilde{\mathbf{v}}^{k+1}) \exp(\mu^k t) \left[ \tilde{F}_{0k} - i\tilde{F}_{0,k+1} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \int_0^t dt' \exp(-\mu^k t') (\tilde{S}_k(t') - i\tilde{S}_{k+1}(t')) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (67)$$

где  $\tilde{F}_{0k}$  и  $\tilde{S}_k(t)$  — коэффициенты в следующем разложении

$$\mathbf{f}_0 = \tilde{F}_{0k} \tilde{\mathbf{v}}^k, \quad \mathbf{s}(t) = \tilde{S}_k(t) \tilde{\mathbf{v}}^k. \quad (68)$$

Для получения этого разложения, принимая во внимание, что матрица  $\tilde{v}_j^k$  может быть плохо обусловленной, мы используем SVD-процедуру. Эта процедура дает коэффициенты  $\tilde{F}_{0k}$  и  $\tilde{S}_k(t)$ , которые обеспечивают минимум следующих форм

$$\sum_j (f_{0j} - \tilde{F}_{0k} \tilde{v}_j^k)^2, \quad \sum_j [s_j(t) - \tilde{S}_k(t) \tilde{v}_j^k]^2$$

и

$$\sum_k (\tilde{F}_{0k})^2, \quad \sum_k [\tilde{S}_k(t)]^2.$$

Если вектор источника  $\mathbf{s} = \text{const}$ , выражение в (67) может быть представлено как

$$\mathbf{f}(t) = \sum_k^{\operatorname{Im}(\mu^k)=0} \tilde{\mathbf{v}}^k \left[ \exp(\mu^k t) \tilde{F}_{0k} + \frac{\exp(\mu^k t) - 1}{\mu^k} \tilde{S}_k \right] +$$

$$+ \sum_k^{\operatorname{Im}(\mu^k) \neq 0 \text{ & } \mu^{k+1} = \mu^{*k}} \operatorname{Re} \left\{ (\tilde{\mathbf{v}}^k + i\tilde{\mathbf{v}}^{k+1}) \left[ \exp(\mu^k t) (\tilde{F}_{0k} - i\tilde{F}_{0,k+1}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\exp(\mu^k t) - 1}{\mu^k} (\tilde{S}_k - i\tilde{S}_{k+1}) \right] \right\}. \quad (69)$$

## Список литературы

- [1] Котельников И.А., Рютов Д.Д., Цидулко Ю.А., Катышев В.В., Комин А.В., Кривошеев В.М. Математическая модель источника нейтронов на основе газодинамической ловушки. // Препринт ИЯФ СОАН СССР, № 90-105. Новосибирск, 1990.
- [2] Днестровский Ю.Н., Костомаров П.К. Математическое моделирование плазмы. // М.: Наука, 1982.
- [3] G.E. Forsythe, M.A. Malcolm, C.B. Moler. Computer methods for mathematical computations. // Prentice-hall, inc. Englewood cliffs, N.J. 07633, 1977.
- [4] Трубников Б.А. Столкновения частиц в полностью ионизованной плазме. // Вопросы теории плазмы. Вып. 1 / Под ред. М.А. Леонтьевича. — 1963. — М.: Госатомиздат. — 133 с.