

中国科学技术大学

博士学位论文



基于随机微分方程的碰撞模拟程序 在等离子体中的应用

作者姓名： 郑艺峰

学科专业： 等离子体物理专业

导师姓名： 庄革教授 肖建元副研究员

完成时间： 二〇二二年三月七日

University of Science and Technology of China
A dissertation for doctor's degree



Application of Collision Simulation Program Based on Stochastic Differential Equations in Plasma

Author: Yifeng Zheng

Speciality: Plasma Physics

Supervisors: Prof. Ge Zhuang, Assoc. Prof. Jianyuan Xiao

Finished time: March 7, 2022

中国科学技术大学学位论文原创性声明

本人声明所呈交的学位论文，是本人在导师指导下进行研究工作所取得的成果。除已特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含任何他人已经发表或撰写过的研究成果。与我一同工作的同志对本研究所做的贡献均已在论文中作了明确的说明。

作者签名：_____

签字日期：_____

中国科学技术大学学位论文授权使用声明

作为申请学位的条件之一，学位论文著作权拥有者授权中国科学技术大学拥有学位论文的部分使用权，即：学校有权按有关规定向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅，可以将学位论文编入《中国学位论文全文数据库》等有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。本人提交的电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。

保密的学位论文在解密后也遵守此规定。

☒ 公开 ☐ 保密（____年）

作者签名：_____

导师签名：_____

签字日期：_____

签字日期：_____

摘 要

等离子体是由电子、离子和中性粒子组成的具有准中性性质的多粒子体系,是相互作用力由电磁力主导的复杂系统。由等离子体中带电粒子的相互碰撞而导致的非线性和多尺度现象在等离子体中是十分常见的,对碰撞过程的研究可以揭示更多的物理。理论上通常用于描述含碰撞等离子体现象的确定性方程是 Fokker-Planck(FP) 方程,相应的数值方法也得到了发展。尽管 FP 方程是关于分布函数演化的确定性方程,但其描述了带电粒子受到德拜球内其他粒子多重小角度碰撞而产生的类似于布朗运动的随机运动。因此对试探粒子在碰撞作用下的随机轨迹的计算更加趋近于第一性原理的计算。根据随机微分方程 (SDE) 与 FP 方程的随机等价性,采用对 SDE 的求解替代 FP 方程的求解,可以将对分布函数演化的复杂求解转换为相对容易的对粒子动力学轨迹的求解。因为等离子体系统具有多自由度和多尺度的特点,想要得到等离子体系统每一时刻的精确信息,采用解析求解是不可能的,必须通过大规模的数值模拟。随着越来越先进计算集群的建设,研究这些物理问题所需求的大规模计算资源逐渐能够得到满足,特别在含有多尺度和多自由度的等离子体物理问题的研究中,数值模拟也变得日益重要。而发展更有效可靠的 SDE 相关数值方法,使人们可以研究更复杂的等离子体碰撞相关现象,如输运、粒子慢化、粒子损失等,加深对此类现象的理解。

本工作开发了一种适用于求解 Stratonovich SDE 的 Monte-Carlo 隐式模拟程序——Implicit Stratonovich Stochastic Differential Equations (ISSDE)。该程序基于 Stratonovich SDE 和 FP 方程的随机等价性理论,首先利用 Rosenbluth MacDonald Judd(RMJ) 势表示下的 FP 方程得到背景等离子体为 Lorentzian 等离子体和 Maxwellian 等离子体,以及背景粒子为任意分布时与 FP 方程具有随机等价性的 Stratonovich SDE;然后根据 Stratonovich 积分的定义和 Euler-Maruyama 数值方法的要求对 Stratonovich SDE 进行数值离散,由此得到隐式中点格式算法;再采用分裂法处理离散后的 Stratonovich SDE,并对碰撞部分采用牛顿法和拟牛顿进行求解;最终通过对 Stratonovich SDE 的求解得到每一个粒子的动力学轨迹。ISSDE 采用隐式中点格式并采用分裂法保证方程确定性部分误差不积累,相比于随机 Runge-Kutta 方法,隐式中点与分裂法组合所得的数值方法具有更高的数值稳定性。对背景等离子体为 Lorentzian 等离子体的情况,该方法可以保证计算粒子碰撞过程时的能量守恒。ISSDE 模拟程序采用 C++ 语言开发,具有标准接口和各种灵活的可扩展模组。

在正确性验证方面,本工作通过模拟电子束在非磁化和磁化致密等离子体中

的慢化过程, 得到粒子系综内每个粒子的随机轨迹, 对平行于入射方向的粒子速度进行系综平均, 所得平均速度的演化和 FP 方程理论解得的系综平均速度的演化是一致的, 进而验证了 ISSDE 的正确性; 通过对电子-电子弛豫过程的模拟展示 ISSDE 计算结果与物理结果的一致性; 通过对入射电子束与背景 Maxwellian 电子的碰撞以及离子束与背景 Maxwellian 电子的碰撞过程展示了 ISSDE 的适用性。

针对具体物理应用, 我们采用 ISSDE 计算托卡马克平衡位型下中性束沉积产生的快离子的损失与慢化过程, 在追踪快离子损失的同时探究碰撞对快离子损失过程中的影响。本工作研究了东方超环 (EAST) 装置中两个同向中性束 (NBI) 快离子在最外层闭合磁面 (LCFS) 边界和第一壁 (FW) 边界的直接损失。数值模拟结果表明, 使用 FW 边界的快离子的损失行为与 LCFS 边界的损失行为有所不同, 特别是对于具有较大回旋半径的快离子。根据我们的计算, 由垂直注入产生的快离子中约有 5.11% 漂出 LCFS, 然后返回 LCFS 内部被磁场俘获。快离子的直接损失率和轨道类型的比例取决于快离子在 $P_\zeta - A$ 空间的初始分布。在库仑碰撞的作用下, 发生投掷角散射和随机扩散, 这将导致更多的快离子损失。对于短时间尺度, 在因碰撞而损失的粒子中, 香蕉离子的比例在垂直束中达到 92.31%, 在切向束中, 当总香蕉粒子比例为 3.4% 时, 由碰撞导致损失的香蕉粒子比例为 58.65%, 这意味着库仑碰撞对香蕉快离子的影响更为显著。对于长时间尺度, 切向束和垂直束由库仑碰撞造成的额外快离子损失分别占总粒子数的 16.21% 和 25.05%。NBI 快离子的慢化过程表明快离子通过库仑碰撞与背景等离子体发生动量和能量交换。

关键词: FP 方程; Stratonovich SDE; Euler-Maruyama; 隐式; 慢化过程; Lorentzian 等离子体; Maxwellian 等离子体; 分裂法; 牛顿法和拟牛顿法; 快离子损失与慢化; 托卡马克

ABSTRACT

Plasma is a multiparticle system with quasi-neutral properties composed of electrons, ions and neutral particles, and is a complex system in which the interaction forces are dominated by electromagnetic forces. The nonlinear and multi-scale phenomena caused by the collision of charged particles in the plasma are very common in plasma and the research on the collision process can reveal more physics. The deterministic equation which is commonly used to describe the phenomenon of collisional plasma is the Fokker-Planck (FP) equation and many corresponding numerical method has been developed. Although the FP equation is a deterministic equation for the evolution of the distribution function, it describes a random motion similar to the Brownian motion of a charged particle in multiple small-angle collisions with other particles inside a Debye sphere. Therefore, the calculation of the random trajectories of the test particles under the collision effect is closer to the first principle calculation. According to the stochastic equivalence between the stochastic differential equation (SDE) and the FP equation, we can convert the solution of the evolution of the distribution function to the solution of the particle dynamics trajectory, which means the solution of the SDE can be used to approximate the solution of the FP equation. Because of the multi-degrees of freedom and multi-scale characteristics of the plasma system, it is hard to obtain accurate information for each moment of the plasma system using analytical solutions. Large-scale numerical simulations is required to carried out the evolution of plasmas. With the construction of advanced computing clusters, the resources for simulating multi-scale physical problems can be met. The development of SDE-related numerical methods can advance the study of related collision plasma problems, such as transports, particle slowing down and particle loss, and improve the understanding of these problems.

In this work, we developed a Monte-Carlo implicit simulation program suitable for solving Stratonovich SDEs: Implicit Stratonovich Stochastic Differential Equations (ISSDE). This program is based on the stochastic equivalence theory of Stratonovich SDE and FP equations. First, the FP equation expressed by Rosenbluth MacDonald Judd (RMJ) potential is used to obtain the corresponding Stratonovich SDE with the background plasma as Lorentzian plasma, Maxwellian plasma, or plasma with an arbitrary distribution; Then according to the definition of Stratonovich integral and the requirements of Euler-Maruyama numerical method, the Stratonovich SDE is numerically discretized to obtain the implicit midpoint algorithm; the splitting method is used to process

the discrete Stratonovich SDE, and the collision Part is calculated with Newton-Raphson or quasi-Newton method; Finally, the kinetic trajectory of each particle is obtained by numerically solving the Stratonovich SDE. ISSDE adopts the implicit midpoint format and the splitting method to ensure that the numerical error of deterministic part does not accumulate. Compared with the stochastic Runge-Kutta method, the numerical method obtained by combining the implicit midpoint and the splitting method has higher numerical stability. When the background plasma is Lorentzian plasma, this method can ensure the energy conservation in the particle collision process. ISSDE simulation program is developed in C++ language, with standard interfaces and various flexible extensible modules.

To verify the correctness of ISSDE, we firstly simulated the slowing-down process of electron beam in non-magnetized and magnetized dense plasma, a random trajectory of each particle in the particle ensemble is obtained, and the evolution of the ensemble average of the velocity which is parallel to the incident direction is consistent with the one obtained from the analytical solution of FP equation. Then the simulation of the electron-electron relaxation process shows the consistency between the ISSDE calculation results and the physical results. The applicability of ISSDE is demonstrated through the collision between the incident electron beam and the background Maxwellian electrons and the collision process between the ion beam and the background Maxwellian electrons.

For applications, we use ISSDE to calculate the loss and slowing process of fast ions generated by neutral beam deposition in equilibrium configuration in the Experimental Advanced Superconducting Tokamak (EAST), and explore the impact of collision on fast ion loss while tracking the loss of fast ions. The prompt loss with the last closed flux surface (LCFS) boundary and the first wall (FW) boundary of the two co-current neutral injection beams are studied. Simulation results show that the loss behavior of fast ions using the FW boundary is different from that of the LCFS boundary, especially for fast ions with a large gyration radius. According to our calculations, about 5.11% of fast ions generated by perpendicular injection drift out of the LCFS and then return inside the LCFS to be captured by the magnetic field. The prompt loss ratio of fast ions and the ratio of orbital types depend on the initial distribution of fast ions in the $P_\zeta - A$ space. Under the effect of Coulomb collisions, the pitch-angle scattering and stochastic diffusion will cause more fast ion loss. For short time scales, among the particles lost due to collisions, the fraction of banana ions reaches 92.31% in the perpendicular beam and 58.65% in the tangential beam when the fraction of banana ions in the

tangential beam is 3.4% of the total ions, which means that the effect of Coulomb collisions on banana fast ions is more significant. For long time scales, the additional fast ion loss caused by Coulomb collisions of tangential and perpendicular beams are 16.21% and 25.05% of the total particles, respectively. The slowing down process of NBI fast ions indicates that the fast ions exchange momentum and energy with the background plasma through Coulomb collisions.

Key Words: FP equation; Stratonovich SDE; Euler-Maruyama; Implicit; Slowing-down; Lorentzian plasma; Maxwellian plasma; Splitting method; Newton-Raphson method; Quasi-Newton method; Fast ion loss and slowing down; Tokamak

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 随机微分方程	3
1.2.1 随机微分方程的起源与发展	3
1.2.2 随机微分方程的数值模拟现状	4
1.2.3 Euler-Maruyama 数值方法	5
1.3 碰撞作用下的弛豫过程与快离子损失	6
1.3.1 等离子体弛豫过程	7
1.3.2 快离子慢化	7
1.3.3 快离子损失	8
1.4 等离子体碰撞模拟程序研究现状分析	8
1.4.1 FP 程序与 Monte-Carlo 程序	8
1.4.2 与快离子损失相关的粒子追踪程序	9
1.5 文章结构	10
第 2 章 FP 方程与 SDE 的随机等价性	12
2.1 FP 方程和 Itô SDE 的随机等价性	12
2.1.1 RMJ 势表示的 FP 方程	12
2.1.2 FP 方程与 Itô SDE 的随机等价性	16
2.2 Itô SDE 与 Stratonovich SDE 的等价性关系	19
2.3 等价于 FP 方程的 Stratonovich SDE 的具体表达式	21
2.3.1 Lorentzian 等离子体中的 Stratonovich SDE	21
2.3.2 Maxwellian 等离子体中的 Stratonovich SDE	22
2.4 Itô SDE 与 kinetic SDE 的随机等价性	28
2.5 等价于 FP 方程的 kinetic SDE 的具体表达式	29
2.5.1 Lorentzian 等离子体中的 kinetic SDE	29
2.5.2 Maxwellian 等离子体中的 kinetic SDE	30
2.6 任意分布下 Stratonovich SDE 的表达式	32
2.6.1 通过求解特征向量和特征值来分解扩散矩阵 Q_{ik}	34
2.6.2 通过 Cholesky 分解得到 SDE 扩散系数	34
2.6.3 将碰撞加入到 PIC 中的讨论	41

第 3 章	ISSDE 算法格式与程序设计	42
3.1	Stratonovich SDE 的离散求解	42
3.2	采用分裂法处理外场	46
3.3	牛顿迭代与拟牛顿法	50
3.3.1	非线性方程组解法——牛顿法	50
3.3.2	拟牛顿法数值方法的介绍	51
3.4	随机 Runge-Kutta 法计算碰撞部分	53
3.4.1	随机 Runge-Kutta 方法的基本介绍	53
3.4.2	随机 Runge-Kutta 算法在碰撞算法中的应用	54
3.5	ISSDE 模拟程序的程序设计	61
3.6	ISSDE 程序流程图	62
第 4 章	等离子体中的弛豫过程	64
4.1	电子束在 Lorentzian 等离子体中的慢化过程	64
4.1.1	FP 方程的理论近似结果	64
4.1.2	ISSDE 在非磁化 Lorentzian 等离子体中的数值结果	67
4.1.3	ISSDE 在磁化 Lorentzian 等离子体中的数值结果	72
4.2	Maxwellian 分布入射电子在 Maxwellian 分布背景电子中的弛豫过程	77
4.3	粒子束在 Maxwellian 等离子体中的慢化过程	79
4.3.1	电子束在磁化 Maxwellian 等离子体中的慢化过程	79
4.3.2	离子束在磁化 Maxwellian 等离子体中的慢化过程	81
4.4	本章小结	83
第 5 章	托卡马克中的快离子损失与慢化	85
5.1	平衡位型与初始分布	85
5.2	对碰撞的处理	87
5.3	快离子损失与慢化	90
5.3.1	边界为 LCFS 和 FW 的直接损失	90
5.3.2	由库仑碰撞引起的快离子损失	97
5.4	快离子在碰撞作用下的慢化与能量沉积	100
5.5	本章小结	103
第 6 章	总结与展望	109
6.1	工作总结	109
6.2	未来工作展望	110

参考文献	112
附录 A 随机 Runge-Kutta 方法	122
A.1 随机微分方程的随机 Taylor 展开	122
A.2 Stratonovich 多重积分的 Mathematica 计算	126
A.3 随机 Runge-Kutta 方法的双色有根树理论	127
A.4 强 1.5 阶随机 Runge-Kutta 算法	129
致谢	135
在读期间发表的学术论文与取得的研究成果	137

符 号 说 明

ν	碰撞频率
e	元电荷量
m_e	电子质量
z	核电荷数
$\ln \Gamma$	库仑对数
ϵ_0	真空介电常数
$\mathbf{x}$	位置矢量
$\mathbf{v}$	速度矢量
n_e	电子密度
$\mathbf{W}_t$	维纳过程
$\mathbf{E}$	电场强度矢量
$\mathbf{B}$	磁场感应强度矢量

第1章 绪 论

1.1 引言

等离子体是区别于固态、液态和气态的物质的“第四态”，是物质变成气态后获得更多能量发生电离而产生的由电子、离子和中性粒子组成的具有准中性性质的多粒子体系，是相互作用力由电磁力主导的复杂系统。由等离子体的电磁性质和能够保持电中性的性质，使得等离子体能够展现波动、非线性相干结构和湍动等丰富的集体运动行为。

对于一般中性气体，有效相互作用半径远小于粒子平均自由程，粒子之间的相互作用力为 Van der Waals 力，粒子发生碰撞的作用时间十分短暂，在这个过程中粒子速度方向和大小发生突变。在远大于粒子平均自由程的空间尺度上，微观运动不重要，可以看成连续介质，宏观流体模型适用。对于弱电离 (1%)，主要是电子和中性粒子发生短程相互作用，该相互作用力与中性粒子之间的相互作用力相似但有差异，不同之处在于带电粒子将受到自身产生自洽场以及外加电磁场的作用力。对于强电离等离子体，带电粒子之间的相互作用为主要部分。由于库仑力的长程性，带电粒子受到的作用力包含长度小于德拜长度的碰撞相互作用，长度大于德拜长度的电磁长程相互作用，例如由电荷堆积或分离产生的电场以及由等离子体电流产生的磁场。带电粒子的大角度偏转主要是由多重的小角度偏转累积而成。这里带电粒子的轨道不是简单的折线，而是不断发生小偏转并且逐渐形成大拐弯的曲线。在一定近似下，可以将带电粒子间的多体碰撞看成是一系列无关的二体碰撞的叠加^[1]。

在等离子体研究中，多尺度和多自由度的性质十分明显，其多尺度的性质体现在空间尺度，时间尺度和能量尺度等，其多自由度体现在等离子体的多粒子体系以及相互作用都为多体相互作用。空间尺度可以由电子回旋半径到恒星大小，时间尺度范围可以从电子回旋周期到星系演化长短，温度尺度范围可以从火焰的 10^{-1}eV 到聚变 α 粒子的 MeV 等。正因为等离子体的多尺度性质，在研究方法方面，往往会根据具体研究对象的尺度大小，做一些近似处理。例如当等离子体十分稀薄的情况，等离子体可以当作独立粒子系统，这时可以采用单粒子模型对等离子体进行近似，求解每个粒子的轨迹；当等离子体十分稠密时，等离子体可以当作连续介质，这时可以采用宏观流体模型进行近似。相比于等离子体的宏观描述，采用微观描述也是一种基本的方法，因为等离子体是多粒子系统，因此可以采用统计方法进行处理。微观描述先得到等离子体的分布函数，分布函数是不可测量，而根据分布函数的矩得到各个可测宏观物理量。采用微观量统计的方法可以得到流体描述无法得到的性质，例如 Landau 阻尼。从微观描述出发，就需要

求解粒子分布函数演化的动理论方程。分布函数的各阶矩包括等离子体的质量, 平均速度, 平均能量, 压强等。采用动理论方程还可以求解等离子体各种非平衡过程, 包括弛豫过程和输运过程。弛豫过程是等离子体由非平衡态向平衡态过渡的过程, 例如粒子束入射致密等离子体中的慢化过程, 偏离各向同性 Maxwellian 速度分布等离子体逐渐趋于 Maxwellian 速度分布的过程。而输运过程是稳恒非平衡态发生的非平衡过程, 例如等离子体中的粒子流, 电流和热流等。用于描述输运过程的物理量如扩散系数、电阻率、热导系数等。这些非平衡过程是由带电粒子之间的碰撞和长程相互作用共同导致的, 因此从微观上对这些非平衡过程进行研究, 就需要研究等离子体中的碰撞相互作用。

对等离子体中碰撞的研究通常采用的是试探粒子近似方法, 在弛豫过程的求解中只考虑试探粒子在背景等离子体中受到的作用力, 而不考虑背景粒子受到的反作用力或者试探粒子之间的相互作用力, 然后得到试探粒子的轨迹, 最终通过统计的方法得到粒子分布函数以及分布函数各阶矩随时间的变化。而在考虑密度相近的粒子群由于碰撞发生的物理过程时, 即考虑输运过程时, 不仅要考虑粒子群之间的相互作用, 还要考虑同种粒子间的碰撞相互作用, 这种情况就更为复杂。在这篇文章中我们只考虑试探粒子的弛豫过程。研究含碰撞的等离子体微观描述时, 可以采用含碰撞项的动理论方程。动理论方程中碰撞项可由多种途径得到, 例如从各种碰撞模型得到, 包括 Krook 碰撞模型, Boltzmann 碰撞模型, Landau 碰撞模型, FP 碰撞模型。也可以从刘维尔方程经 BBGKY 或者 Klimontovich 途径导出。碰撞模型的发展都是基于一些假设并一步步递进的, 例如 Boltzmann 碰撞模型假定 1. 所有碰撞都是两体碰撞; 2. 在碰撞前后粒子均做自由运动; 3. 分子混沌假说, 即粒子间碰撞次数只和两粒子分布函数有关, 而和粒子之间的关联无关。Landau 碰撞模型是在 Boltzmann 碰撞模型的基础上假设碰撞的作用力为库仑相互作用, 并采用了小角近似。而 FP 碰撞模型的基本假设认为 1. 碰撞过程是弹性碰撞; 2. 碰撞过程是马尔可夫过程的, 即粒子由一个状态转换到另一个状态的概率与历史无关, 只与当前状态有关; 3. 多体碰撞过程相当于一系列两体碰撞的线性叠加^[1]。因为 FP 碰撞模型是建立在多重小角碰撞的基础上的, 因此更符合等离子体碰撞过程的真实情况。在本文中我们主要采用 FP 碰撞模型来处理等离子体中的碰撞问题。

由于等离子体碰撞的多体相互作用过程, 以及不同尺度过程的相互耦合, 可能会使近似理论失效, 因此, 从理论解析解的研究也变得更加困难^[2]。对于这类复杂问题, 数值模拟往往是一种有效的手段。随着先进计算机集群的建设, 大尺度物理问题所需求的大规模计算资源逐渐能够得到满足, 特别在含有多尺度和多自由度的等离子体物理中, 数值模拟也变得日益重要。然而, 即便是采用数值计算, 对于多尺度过程的求解也可能会因为不合适的算法而产生误差的积累。针

对这种情况, 各种带电粒子动力学的保结构算法被开发出^[3-7]。近几年, 各种基于不同数学原理的先进等离子体保几何结构算法得到充分的研究, 该类算法可以保证数值计算的长期稳定性, 比如, 带电粒子导心系统的变分辛算法^[8]、经典带电粒子的保体积算法^[9-11]等。尽管 FP 方程是关于分布函数演化的确定性方程, 但其描述了带电粒子受到德拜球中其他粒子多重小角度碰撞而产生的类似于布朗粒子的随机运动。因此对试探粒子在碰撞作用下的随机运动轨迹的计算和统计是我们设计碰撞算法的基本出发点。然而, 当前基于等离子体的 FP 方程的数值方法大多数是基于网格法的, 算法构造过程存在一些难点, 一般需要通过回旋近似或降维等方式求解简化 FP 模型^[12-14]。相比较而言, 基于粒子的数值方法因为一些原因更受欢迎, 例如粒子 Monte-Carlo 方法更简单、直观并且收敛速度不依赖于维数。而且基于粒子的混合模型, 其计算效率也很高^[12,15]。

根据 SDE 与 FP 的随机等价性, 我们可以将对分布函数演化的求解转换为对粒子动力学轨迹的求解以此来简化对 FP 方程的数值求解。SDE 理论在很多科研领域, 如生物, 化学, 流行病学, 力学, 微电子学, 经济学等的应用越来越多。在过去几十年里, 除了数学领域, 在工程和物理中的科研人员也对 SDE 数值方法越发重视^[16]。在物理研究中, SDE 在各二级学科如分子动力学、神经动力学、天体动力学等都有应用。SDE 与偏微分方程 FP 方程的随机等价性是 SDE 理论的一个重要研究内容。将对 FP 方程的求解转换为对 SDE 的求解有很多优势, 首先, 这样处理可以在保证物理信息不丢失的前提下, 简化方程的求解; 其次, 采用 SDE 对动力学系统进行描述, 实质是将对分布函数的求解转换为对粒子演化轨迹的求解, 可以得到粒子演化的轨迹信息; 最后, 常微分方程 (ODE) 的保几何结构算法已经比较成熟, 我们可以采用分裂法的思想对确定性部分采用保结构算法, 而碰撞部分采用一般的随机数值算法, 或者类比于保结构算法思想利用几何算法理论获得具有更加优良稳定性的 SDE 数值方法^[16]。

1.2 随机微分方程

本节将首先介绍 SDE 的起源与发展, 再介绍 SDE 数值方法的研究现状, 最后介绍用于构造 ISSDE 模拟程序的 Euler-Maruyama 数值方法。

1.2.1 随机微分方程的起源与发展

SDE 是在常微分方程, 高等概率论和随机分析等科学的基础上发展起来的一门学科, 它广泛应用于各个自然科学领域。尽管一些随机微分方程在理论上存在唯一解, 但大多数随机微分方程的解不能显式的表达出来。因此, 采用数值的方式, 借助大型计算机, 构造随机微分方程的数值解就显得格外重要^[17]。常

微分方程可以解决确定性问题，但一些实际问题如金融经济中的期权定价问题，生物学中的人口增长问题，多粒子碰撞问题等。随机现象和过程已经不能用常微分方程来解决了。建立数学模型时，需要考虑不确定因素，于是 SDE 开始得到研究和发展。常微分方程模型经常被用来模拟粒子的运动，同样的，偏微分方程也可以用来描述一个粒子系综粒子轨迹的演化。在这个基础上对模型加一些噪声，这些噪声可能来自外界，也有可能是系统本身的随机性带来的^[18]。1827 年，Brown 根据浸在溶液中不断受到水分子撞击而产生的不规则运动提出了 Brown 运动，1905 年，针对 Brown 运动，Einstein 提出水中微粒的转移概率密度的概念，对 Brown 运动进行解释，由此建立 Brown 运动的物理模型。1908 年 Langevin 得到了 Langevin SDE

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v(t) + y(t), \quad (1.1)$$

其中 $v(t)$ 为粒子的速度， m 为粒子质量， α 为常数，表示与摩擦力相关的系数， $y(t)$ 表示随机力。之后，Wiener 对 Brown 运动的轨道性质在数学上做了大量研究，并由此提出 Brown 运动对应的 Wiener 积分，随机过程和随机积分此时开始发展起来。20 世纪 30 年代，Bemstein 提出了随机微分方程的概念，并阐明了随机微分方程与 Kolmogorov 方程基本解之间的联系。Doob 对 Markov 过程和鞅的研究，对随机微分方程的发展作出了贡献。1951 年，Itô 里程碑式地创立了 Brown 运动的 Itô 型 SDE^[19]

$$dX_t = a(t, X_t)dt + b(t, X_t)dW_t, \quad X_{t=0} = X_0, \quad t \geq 0, \quad (1.2)$$

其中 X_t 为随机过程， $a(t, X_t)$ 和 $b(t, X_t)$ 分别为摩擦系数和粘滞系数， W_t 为 Wiener 过程。该论文对随机微分方程的发展具有划时代意义，之后更多学者展开对 SDE 的研究和应用。对于 SDE，由于方程本身的随机因素，使得方程求解比常微分方程复杂，因此 SDE 数值解的研究显得尤为重要。

1.2.2 随机微分方程的数值模拟现状

SDE 数值解的研究已经取得了一定的成果。对于 Itô 型 SDE 常用的数值方法有 Euler 方法、Milstein 方法等基于各阶随机 Taylor 展开式的方法。针对隐式随机算法的开发，Tian 和 Burrage 给出了隐式 Euler 方法、Milstein 方法以及 1.5 阶随机 Taylor 方法^[20]。为了使随机微分方程的数值解更加完备，Platen 和 Wagner 于 1982 年作出了对随机 Taylor 方法各种收敛性的工作^[21]。针对 Stratonovich SDE 数值算法的开发，德国数学家 W. Rumelin 开发了随机 Runge-Kutta 方法^[22]，其基本原理与随机 Taylor 展开式相关。现在 Runge-Kutta 方法已应用于求解泛函微

分方程这类复杂的问题。由于数学家们的不断努力和现代计算机技术的快速发展,SDE 的数值求解方法在不断进步,数值求解的精度也在不断提高。

1.2.3 Euler-Maruyama 数值方法

在 Itô 微积分中, Euler-Maruyama 方法是一个对 SDE 的数值近似。它是求解 ODE 方程的 Euler 方法在 SDE 中的简单扩展。这一小节主要以一个简单的数值算例来展示 Euler-Maruyama 数值算法在 SDE 中的应用^[23]。将 SDE 写成积分形式有

$$X(t) = X_0 + \int_0^t f(X(s))ds + \int_0^t g(X(s))dW(s), 0 \leq t \leq T. \quad (1.3)$$

其中 f, g 都是标量函数, X_0 为随机变量。这里采用 Itô 积分进行计算, 方程的解 $X(t)$ 是随 t 变化的随机变量。现在定义一种求解上述方程的数值方法, 并且将数值方法在时间步长趋于 0 时所得的随机变量 $X(t)$ 作为方程的解。将方程写为微分形式有

$$dX(t) = f(X(t))dt + g(X(s))dW(s), 0 \leq t \leq T. \quad (1.4)$$

在区间 $[0, T]$ 采用一个算法来求解上面微分方程, 首先进行离散处理。使 $\Delta t = \frac{T}{L}$, 其中 L 为某一正整数, 并且有 $\tau_j = j\Delta t$ 。数值近似 $X(\tau_j)$ 表示成 X_j 。Euler-Maruyama 具有如下形式

$$X_j = X_{j-1} + f(X_{j-1})\Delta t + g(X_{j-1})(W(\tau_j) - W(\tau_{j-1})), j = 1, 2, \dots, L. \quad (1.5)$$

方程 (5) 可以由积分形式来理解, 积分形式为

$$X(\tau_j) = X(\tau_{j-1}) + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} f(X_{j-1})ds + \int_{\tau_{j-1}}^{\tau_j} g(X_{j-1})dW_s. \quad (1.6)$$

方程 (1.6) 中每一项都和方程 (1.5) 相对应, 当 $g \equiv 0$ 时, 方程 (1.5) 退化成 Euler 方法。首先我们将离散 Wiener 过程来生成方程 (1.5) 所需要的增量 $W(\tau_j) - W(\tau_{j-1})$, 为了方便起见, 我们将时间步长选为 Wiener 过程增量 δt 的整数倍 $R\delta t$, 其中 $R \geq 1$ 为整数。这样可以使得采用 Euler-Maruyama 计算的时间点序列 $\{\tau_j\}$ 是包含在 Wiener 过程的时间序列 $\{t_j\}$ 中的。列举一个将 Euler-Maruyama 方法应用到线性 SDE 的例子

$$dX(t) = \lambda X(t)dt + \mu X(t)dW(s), X(t) = X_0. \quad (1.7)$$

其中 λ 和 μ 都是实常数; 因此在方程 (1.4) 中 $f(X) = \lambda X$ 和 $g(X) = \mu X$ 。这个是金融数学中的 Black-Scholes 偏微分方程可以由方程 (1.7) 得到^[24]。方程 (1.7) 的

解析解为^[25]

$$X(t) = X(0) \exp \left(\left(\lambda - \frac{1}{2} \mu^2 \right) t + \mu W(t) \right), \quad (1.8)$$

取 $\lambda = 2$, $\mu = 1$, $X_0 = 1$ 。令 Wiener 过程在区间 $[0, 1]$ 之间和 $\Delta t = 2^{-8}$, 并且按照方程 (1.8) 得到方程 (1.7) 的解析解 X_{ture} 。然后采用 Euler-Maruyama 计算时的时间步长 $\Delta t = R\delta t$, 令 $R = 4$ 。采用 Euler-Maruyama 的一般步长所对应的增量 $W(\tau_j) - W(\tau_{j-1})$ 的数值为

$$W(\tau_j) - W(\tau_{j-1}) = W(jR\delta t) - W((j-1)R\delta t) = \sum_{k=jR-R+1}^{jR} dW_k, \quad (1.9)$$

由此得到 Euler-Maruyama 方法的数值解。得到结果如图1.1。此时在 $t = T$ 的点

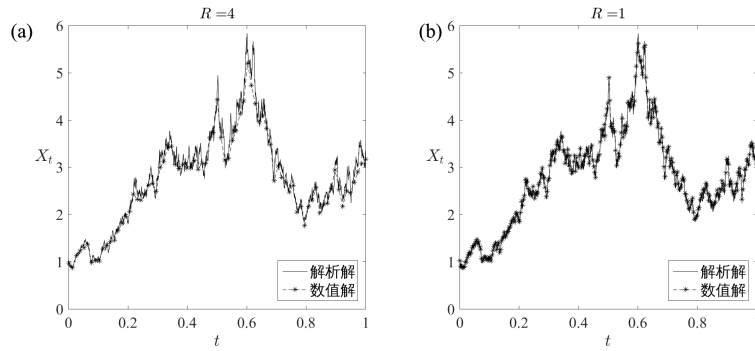


图 1.1 Black-Scholes 偏微分方程的解析解与数值解的对比，实线表示解析结果，* 表示数值结果。(a) 为数值计算时间步长是 Wiener 过程时间步长 4 倍时的结果，(b) 为数值计算时间步长与 Wiener 过程时间步长相同时的结果。

数值解和解析解的误差为 $emerr = 0.6907$ ，当取 $R = 1$ 时，如图1.1，在 $t=T$ 的点数值解和解析解的误差为 $emerr = 0.0821$ 。由此可得，采用 Euler-Maruyama 进行数值计算的时间步长越小，所得的数值解与解析解的误差越小。

1.3 碰撞作用下的弛豫过程与快离子损失

将等离子体加热有多种方式，除了欧姆加热还有很多辅助加热形式，主要分为射频波加热和中性束注入加热，根据工作频率的不同可以将射频波加热细分为米波段的离子回旋共振加热，厘米波段的低杂波共振加热，以及毫米波段的电子回旋共振加热^[26]。在非磁化等离子体中，采用高能电子束入射到致密等离子体进行加热也是一种可行的机制。高能电子束入射到致密等离子体中将发生电子束与等离子体的碰撞相互作用，高能电子束在平行入射方向将发生慢化过程。因此，探明入射电子束在等离子体中的弛豫过程以及各物理量系综平均的演化是有意义的。相关的研究已经作出，比如 Rudakov(1971) 认为粒子束在致密等离子体中的弛豫过程与 Cerenkov 效应的诱发有关^[27]；Husseniny(1970) 计算了单

能粒子束入射至任意分布等离子体中时总的有效截面^[28]。中性束注入等离子体后通过碰撞电离和电荷交换沉积为快离子，再通过快离子与背景等离子体的碰撞将动量和能量传递给背景粒子，快离子与背景等离子体在这个过程中发生弛豫过程。热核聚变反应产生的 α 粒子在等离子体中的能量是点火之后维持聚变持续燃烧的重要能量来源。对等离子体特征时间接近 α 粒子慢化时间的点火过程中， α 粒子在等离子体中的能量沉积过程是十分重要的^[29]。压缩 D-T 等离子体时费米面升高到足够高时，那么核反应产生的高能离子将通过核碰撞将其能量主要提供给其他离子，而不是提供给电子，在这种情况下，其中一些离子可能会进一步发生聚变反应，D-T 聚变可以看成是链式反应，采用随机相位近似方法，A. Dar(1974) 发现离子在简并电子气中慢化与链式反应的关联^[30]。在聚变装置中，由中性束沉积产生的快离子和聚变产生的 α 粒子能量很高，对高能离子的约束是聚变研究中重要的物理问题，无法被磁场约束的快离子被称为损失粒子，这些损失粒子将会撞击在装置器壁上，对装置及等离子体稳定造成损害。

1.3.1 等离子体弛豫过程

大多数自然界与实验室中的等离子体因为受到温度、密度、磁场等控制条件的稳定问题以及扰动的影响在大部分时间都处于非平衡状态。等离子体的非平衡主要包括弛豫过程和输运过程，弛豫过程中等离子体从非平衡态向平衡态过渡，例如粒子束入射致密等离子体中的慢化过程，偏离各向同性 Maxwellian 速度分布等离子体逐渐趋于 Maxwellian 速度分布的过程。我们可以采用弛豫速率来表征弛豫过程进行的快慢。而输运过程是稳恒非平衡态发生的非平衡过程，例如等离子体中的粒子流，电流和热流等。用于描述输运过程的物理量如扩散系数、电阻率、热导系数等^[1,31]。高能电子束的慢化，快离子的慢化以及 α 粒子慢化都属于弛豫过程，在本文中我们只讨论弛豫过程，并将采用 ISSDE 来计算这些过程。

1.3.2 快离子慢化

托卡马克装置中高能离子有多种来源，例如聚变反应产生的 α 粒子、中性束注入沉积产生的快离子、射频波共振加热加热产生的高能离子，如何对高能离子进行有效约束是高能离子研究领域的一个重要课题。相比于其他加热方法，中性束注入因为其物理机制简单、加热效率高，并且与背景等离子体是弱耦合等优点，使中性束注入加热成为最有效的辅助加热手段之一。为了能够更高效的加热托卡马克装置中的等离子体，人们希望中性束注入后快离子的能量沉积位置最好是在等离子体的芯部。因而了解中性束注入后沉积为快离子的初始分布、快离子的慢化过程以及驱动电流的形成是十分有意义的^[32]。入射中性束粒子通过与

电子，离子的电荷交换和碰撞电离，然后通过库仑碰撞将能量传递给电子和离子。除了等离子体加热，中性束也是电流驱动的一种方法^[33]。

1.3.3 快离子损失

快离子损失来源于非对称磁场以及 3D 扰动的影响，这些非对称磁场的产生来自有限数量环向场线圈，铁磁插入件的包含，测试包层模块的铁磁材料，以及用来影响边界局域模的共振磁扰动控制的共振磁扰动线圈产生的场。而 3D 扰动包括例如快离子驱动 Alfvén 模，锯齿模或者新经典撕裂模的影响^[34-35]。在这些扰动因素的影响下，快离子在磁场漂移的作用下，容易挣脱磁场束缚而漂出等离子体边界并撞击在第一壁上而造成快离子的损失。这种损失在降低等离子体加热效率和能量约束时间的同时，对第一壁也会造成损伤^[36]。快离子损失有多种类型，直接损失是指由于快离子未被角向场约束住，轨道偏离较大，以致撞击器壁而产生的损失。快离子直接损失对边缘等离子体的径向电场和极向电场旋转变化都会产生不可忽视的作用^[37-39]。对快离子直接损失的研究至今已有将近半个世纪的历史，对快离子轨道进行追踪可以得到直观的快离子直接损失图^[38]。

1.4 等离子体碰撞模拟程序研究现状分析

1.4.1 FP 程序与 Monte-Carlo 程序

对含碰撞等离子体系统，一个常用的理论研究模型就是 FP 方程。对 FP 方程这个六维的偏微分方程，在积分过程中将需要很大的计算量，因此算法难以应用^[40-41]。通常为了简化 FP 方程，人们在连续性 (基于网格) 方法中使用导心近似或者降维处理^[12-14]。相比于连续性方法，基于粒子的方法在某性方面或许更受欢迎。例如，粒子 Monte-Carlo 方法更简单，直观并且收敛速度不依赖于维数。对于基于粒子的混合数值方法，他们更加高效，特别是对于部分热化的系统^[15,41]。很多研究工作已经根据 SDE 的基本理论开发了处于处理含碰撞等离子体的 Monte-Carlo 程序。T. Takizuka 通过 Monte Carlo 方法介绍了一种二体碰撞模型，并且这个模型可以描述 Landau 形式的碰撞积分^[42]；L. G. Eriksson 等对轨道平均的 Fokker-Planck 方程构造了一个 Monte-Carlo 算符用来研究碰撞和波粒相互作用^[43-44]；根据 SDE 与 FP 方程的随机等价性，将对分布函数的求解转化为对粒子轨迹的处理，能够让人们简单直观地处理含碰撞的等离子体问题。在这方面，前人也有相应的研究，M. G. Cadjan (1997)^[45] 采用含有库仑碰撞的 Langevin 方法来求解激光脉冲入射致密等离子体中的吸收系数；M. Sherlock (2008)^[46] 采用库仑碰撞 Monte-Carlo 方法研究电子束入射到等离子体中的慢化行为；R. S. Rosin, L. F. Ricketson, etc. (2014)^[41] 采用 Itô SDE 进行 Monte-Carlo 模拟研究；Guannan

Zhang 和 Diego del-Castillo-Negrete (2017)^[47] 基于向后的 Monte-Carlo 方法计算了逃逸电子的动力学行为; D. E. Stevens (2014)^[48] 数值上描述了慢化过程中能量的变化。

除了试探粒子 Monte-Carlo 程序, 一些采用 Monte-Carlo 方法来包含碰撞的 PIC 方法也被发展出来, 并且被应用到很多物理中。比如 R. W. Boswell 和 I. J. Morey 采用带有非周期边界条件的 PIC-MCC 来模拟射频放电^[49]。M. Surendra 和 David B. Graves 采用 PIC-MCC 模拟了平行板电极间氦射频辉光发电的结构^[50]。David Vender 和 Rod W. Boswell 采用 PIC-MCC 模拟了低压情况下平行板射频发生器之间等离子体的生成^[51]。这些 PIC-MCC 都包含了电子和中性粒子的碰撞, 离子和中性粒子的碰撞, 以及电子和离子之间的碰撞。这些 PIC-MCC 在处理碰撞的过程中, 是采用随机配对的方式来选取电子-电子, 电子-离子对, 然后进行二体碰撞。而没有利用 SDE 与 FP 的随机等价性。采用 SDE 与 FP 方程的随机等价性来处理碰撞过程, 可以为碰撞的随机性提供了理论基础。基于 SDE 的 PIC Monte-Carlo 程序也许能更好的反映真实的碰撞过程。

1.4.2 与快离子损失相关的粒子追踪程序

相比于上述的 FP 程序与 Monte-Carlo 程序, 粒子追踪程序的目的是对粒子进行追踪, 为了考虑碰撞的影响才逐渐演化为 Monte-Carlo 的粒子追踪程序。对快离子在托卡马克磁化等离子体中行为的研究, 很多粒子追踪程序被开发出来, 主要分为导心轨道追踪程序和全轨道试探粒子追踪程序。导心轨道追踪程序如 ORBIT^[52], OFMC^[53], ASCOT4^[54], GCMP^[55], GYCAVA^[56-57] 等。OFMC 中提及了碰撞采用了 Monte-Carlo 技巧, 但是具体采用的公式和依据的理论并没有给出说明。ASCOT4 同时包含了全轨道粒子追踪和导心轨道粒子追踪, 全轨道的粒子追踪的库仑碰撞部分采用了随机微分方程, 确定性部分采用蛙跳法而随机部分采用随机 Euler 方法。导心轨道粒子追踪对库仑碰撞的处理在初始版本中是洛伦兹力部分采用导心坐标, 碰撞部分则采用速度空间坐标, 后来改进版本采用洛伦兹力部分和碰撞部分都是采用了导心坐标来描述。GCMP 和 GYCAVA 程序中通常对碰撞不进行处理, 即只考虑粒子的受到 Lorentzian 力作用下的粒子轨迹。GYCAVA 采用的是回旋动理学理论来构造的, 可以考虑有限 Larmor 半径效应^[57]。最新版的 GYCAVA 中对碰撞的处理也是采用导心坐标进行处理的。当考虑碰撞时, 通常是要计算快离子的慢化和能量沉积, 因为快离子和背景等离子体的碰撞是快离子能量沉积的主要原因^[58]。全轨道粒子追踪程序如 VENUS-LEVIS^[5]。VENUS-LEVIS 中对碰撞部分的描述也是采用了 E. Hirvijoki 介绍的导心坐标中的碰撞算符^[59]。包含碰撞的全轨道试探粒子追踪程序的开发如 SOFT^[35] 程序, SPIRAL 程序^[60]。

在考虑快离子直接损失时,碰撞的影响并不显著,这是因为碰撞的时间尺度远大于快离子直接损失的时间尺度^[61]。而由其他因素带来的快离子损失例如共振扰动线圈 (RMPs) 起主要影响作用^[56,62]。而在慢化时间尺度上,碰撞的影响是不能忽略的,此时快离子将经历投掷角散射损失和随机扩散损失。磁波纹损失也会成为了主要考虑的因素^[63]。快离子的碰撞过程对快离子慢化和能量沉积的影响更大。

1.5 文章结构

本文结构如下:

在第二章中,我们首先得到 RMJ 势表示下的 FP 方程,根据 FP 方程与 Itô SDE 的随机等价性,Itô 积分与 Stratonovich 积分以及 kinetic 积分的等价性关系,分别得到等价于 FP 方程的 Stratonovich SDE 和 kinetic SDE 的解析表达式,再根据背景等离子体的不同分布得到 Lorentzian 等离子体与 Maxwellian 等离子体情况下 Stratonovich SDE 和 kinetic SDE 的具体表达式。针对背景等离子体为任意分布的情况,我们采用 Cholesky 分解的方法得到对应的 Stratonovich SDE 的表达式。

在第三章中,我们根据 Stratonovich 积分的定义和 Euler-Maruyama 方法的要求对 Stratonovich SDE 进行离散,得到碰撞积分隐式中点格式的离散表达式。采用分裂法的思想处理外场和碰撞部分,确定性的外场部分采用保体积算法处理,碰撞部分的隐式中点格式采用牛顿法和拟牛顿法进行处理,并介绍了含碰撞等离子体随机 Runge-Kutta 方法的构造以此作为对比。得到碰撞算法后设计 Monte-Carlo 隐式模拟并程序 ISSDE,分别介绍程序的各个模块以及程序流程图。

在第四章中,我们首先采用 ISSDE 计算了电子束入射简化的 Lorentzian 等离子体中的慢化过程,并与 FP 方程的解析数值解进行对比,以验证程序的正确性。根据简化的 Lorentzian 等离子体动能守恒的性质,比较采用分裂法和采用全 Runge-Kutta 方法两者的能量误差,由此考察 ISSDE 的长期稳定性。然后计算背景粒子为 Maxwellian 等离子体时,服从与背景相同分布的电子在碰撞作用下温度随时间的变化,由此验证 ISSDE 计算过程物理的正确性。计算了电子束在 Lorentzian 等离子体中情况后,再计算电子束在 Maxwellian 分布电子以及离子束在 Maxwellian 分布电子背景中的弛豫过程,并得到物理量系综平均随时间的变化。

在第五章中,我们计算中性束沉积后产生快离子在 EAST 中的弛豫和快离子损失,我们首先采用 EFIT 计算得到 EAST 中的平衡位型,然后采用 NUBEAM 计算得到初始时刻快离子的初始分布,然后我们介绍计算过程中对碰撞的处理,

最后我们得到在碰撞作用下快离子在 EAST 中的慢化与损失过程，并对损失的原因进行了分析。

最后，我们在第六章总结全文内容，并简述下一步研究方向。

第2章 FP 方程与 SDE 的随机等价性

ISSDE 模拟程序的目的是通过对 SDE 的求解得到粒子轨迹，主要依据 FP 方程与 SDE 的随机等价性。SDE 因为对随机变量积分定义的不同而有多种表示，最为常用的有三种，分别为 Itô SDE，Stratonovich SDE 以及 kinetic SDE。对应的随机积分与黎曼积分是不同的，尽管这三种 SDE 存在等价关系，在数值求解过程中，需要注意区分采用的是哪一种形式的积分。这些 SDE 在不同的领域研究的倾向不同，研究物理问题更倾向于采用 Stratonovich SDE 和 kinetic SDE，因为 Stratonovich 积分和黎曼积分具有相同的链式法则^[24]，而 kinetic SDE 能够保证细致平衡和爱因斯坦定理^[64-66]。下面我们将先介绍 Rosenbluth MacDonald Judd(RMJ) 势表示下的 FP 方程，然后根据 FP 方程与 Itô SDE 的随机等价性，Itô SDE 和 Stratonovich SDE 以及 kinetic SDE 的等价关系，由此得到等价于 FP 方程的 Stratonovich SDE 和 kinetic SDE。根据背景等离子体分布的不同，考虑 Lorentzian 等离子体，Maxwellian 等离子体时等价于 RMJ 势下 FP 方程的 Stratonovich SDE 和 kinetic SDE。当背景粒子服从任意分布时，根据 Cholesky 分解得到对应的 Stratonovich SDE。

2.1 FP 方程和 Itô SDE 的随机等价性

2.1.1 RMJ 势表示的 FP 方程

由 Klimontovich 方程出发得到 Boltzmann 方程，再根据对碰撞的积分的具体化，得到 RMJ 势表示下的 FP 方程。定义六维相空间中的微观分布函数，再将微观分布函数求时间导数，便可得到 Klimontovich equation。而对满足不可压条件的洛伦兹力系统的 Klimontovich 方程求系综平均，即可得到 Boltzmann 方程。六维相空间中的微观分布函数为

$$N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \sum_{i=1}^{N_0} \delta(\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}_i) \delta(\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}_i). \quad (2.1)$$

其中 N_0 表示粒子总数， i 表示粒子标号， $N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ 表示 a 类粒子 t 时刻在相空间 $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ 处的粒子数的总和，可以理解为对 N_0 个粒子 t 时刻在相空间 $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ 处的遍历求和，标号为 i 的粒子在 t 时刻，如果有 $\bar{\mathbf{x}}_i = \mathbf{x}, \bar{\mathbf{v}}_i = \mathbf{v}$ ，则其值为 1，否则为 0，则遍历 N_0 个粒子后，得到 t 时刻在相空间 $(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ 处的粒子数总和。 $N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ 是一个标量函数， $(\bar{\mathbf{x}}_i(t), \bar{\mathbf{v}}_i(t))$ 表示 t 时刻第 i 个粒子在相空间的坐坐标，即表示第

i 个粒子的弹道。将微观分布函数对时间求导得 Klimontovich 方程

$$\frac{\partial N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot (\mathbf{v} N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)) + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} [N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)] = 0, \quad (2.2)$$

其中 $\mathbf{a}$ 为粒子所受到的加速度。满足不可压缩条件的洛伦兹力系统的 Klimontovich 方程

$$\frac{\partial N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_a}{m_a} [\mathbf{E}^m(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}^m(\mathbf{x}, t)] \cdot \frac{\partial N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = 0, \quad (2.3)$$

其中 $\mathbf{E}^m(\mathbf{x}, t)$ 表示微观电场, $\mathbf{B}^m(\mathbf{x}, t)$ 表示微观磁场。令 $\delta N(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, $\delta \mathbf{E}^m(\mathbf{x}, t)$, $\delta \mathbf{B}^m(\mathbf{x}, t)$ 分别表示微观量对相对系综平均的涨落量。令 $f_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ 分别表示 a 类粒子微观分布函数 $N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$, 微观电场 $\mathbf{E}^m(\mathbf{x}, t)$ 和微观磁场 $\mathbf{B}^m(\mathbf{x}, t)$ 的系综平均, 对上述方程求解系综平均得

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_a}{m_a} [\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)] \cdot \frac{\partial f_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} \\ &= - \left\langle i \frac{q_a}{m_a} [\delta \mathbf{E}^m(\mathbf{x}, t) + \mathbf{v} \times \delta \mathbf{B}^m(\mathbf{x}, t)] \frac{\partial \delta N_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} \right\rangle \\ &= \left. \frac{\delta f_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right|_{\text{collision}}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

这就是 Boltzmann 方程。其中 $\left. \frac{\delta f_a(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)}{\delta t} \right|_{\text{collision}}$ 为碰撞项。

由 Boltzmann 方程中碰撞项的基本定义出发, 引入碰撞的转移概率分布密度, 将粒子的分布函数对粒子演化速度改变量做泰勒展开到二阶并化简来得到一般的 FP 方程。再由库仑碰撞模型确定转移概率分布密度的具体表达式, 进而求出 FP 方程中的摩擦系数和扩散系数, 即得到 Rousenbluth 势的 FP 方程。根据碰撞项的定义

$$\left(\frac{\delta f_a}{\delta t} \right)_c = \frac{f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) - f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t - \Delta t)}{\Delta t}, \quad (2.5)$$

其中 $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t)$ 为 t 时刻, 粒子处在位置 $\mathbf{r}$, 速度 $\mathbf{v}_a$ 的概率分布密度, 只要求出 $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t)$ 和 $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t - \Delta t)$ 的表达式, 即可求出碰撞项 $\left(\frac{\delta f_a}{\delta t} \right)_c$ 。引入转移概率分布密度, 假定每一次碰撞使速度粒子速度发生一个变化 $\mathbf{v}_a \rightarrow \mathbf{v}_a + \Delta \mathbf{v}_a$, 则有

$$f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) = \int d(\Delta \mathbf{v}_a) f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, t - \Delta t) \cdot \psi(\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, \Delta \mathbf{v}_a, t - \Delta t), \quad (2.6)$$

其中 $\psi(\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, \Delta \mathbf{v}_a, t - \Delta t)$ 为转移概率分布密度, 是 $t - \Delta t$ 时刻速度 $\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a$, 粒子速度改变量 $\Delta \mathbf{v}_a$ 的函数。表示粒子在 t 时刻处于位置 $\mathbf{r}$, 速度 $\mathbf{v}_a$ 的概率分布密度 $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t)$, 由粒子在 $t - \Delta t$ 时刻处在位置 $\mathbf{r}$, 速度为 $\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a$ 的概率密度 $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, t - \Delta t)$ 在 Δt 时间间隔内以转移几率 $d(\Delta \mathbf{v}_a) \cdot \psi(\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, \Delta \mathbf{v}_a, t - \Delta t)$ 转移而得。将上述方程中 $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, t - \Delta t)$ 在 $f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t - \Delta t)$ 处按 $\Delta \mathbf{v}_a$ 作泰勒

展开到二阶并化简得 FP 方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = & -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \cdot (f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t - \Delta t) \langle \Delta \mathbf{v}_a \rangle) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} : (f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t) \langle \Delta \mathbf{v}_a \Delta \mathbf{v}_a \rangle), \end{aligned} \quad (2.7)$$

其中

$$\langle \Delta \mathbf{v}_a \rangle = \frac{1}{\Delta t} \int d(\Delta \mathbf{v}_a) \psi(\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, \Delta \mathbf{v}_a) \Delta \mathbf{v}_a, \quad (2.8)$$

$$\langle \Delta \mathbf{v}_a \Delta \mathbf{v}_a \rangle = \frac{1}{\Delta t} \int d(\Delta \mathbf{v}_a) \psi(\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, \Delta \mathbf{v}_a) \Delta \mathbf{v}_a \Delta \mathbf{v}_a, \quad (2.9)$$

分别为摩擦系数和扩散系数，摩擦系数的作用是使粒子系速度减慢，扩散系数的作用是使速度分布函数在速度空间弥散。在单位时间内，一个服从 $f_a(\mathbf{v}_a)$ 分布的粒子与一群服从 $f_b(\mathbf{v}_b)$ 的粒子相碰时， $\mathbf{v}_a$ 和 $\mathbf{v}_b$ 表示 a 类粒子和 b 类粒子落入立体角元 $d\Omega$ 的概率正比于

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Delta t |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b| f_b(\mathbf{v}_b) d\mathbf{v}_b \quad (2.10)$$

其中 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ 为 a 粒子落入立体角元 $d\Omega$ 的概率即微分散射界面， $d\sigma$ 为散射界面的微元， θ 为散射角， ϕ 为方位角。其图像如图2.1，因此，由库仑碰撞确定转移概率

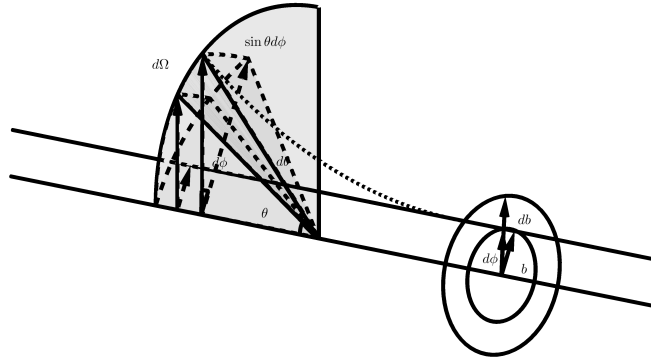


图 2.1 粒子通过库伦碰撞落入单位立体角 $d\Omega$ ，其中 b 为瞄准距离，即平行入射粒子速度方向上入射粒子与靶粒子的最近距离， $db, d\phi$ 分别表示径向和极向的增量。

$\psi(\mathbf{v}_a - \Delta \mathbf{v}_a, \Delta \mathbf{v}_a)$ 的具体表达式为

$$\psi(\mathbf{v}_a, \Delta \mathbf{v}_a) d(\Delta \mathbf{v}_a) = \Delta t \sum_b |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b| d\sigma f_b(\mathbf{v}_b) d\mathbf{v}_b, \quad (2.11)$$

其中 $f_b(\mathbf{v}_b)$ 为被散射粒子的分布函数， $\mathbf{v}_b$ 为被散射粒子和散射粒子组成的质心

系中的速度。带入 (2.8),(2.9) 得

$$\langle \Delta \mathbf{v}_a \rangle = \sum_b \int d\mathbf{v}_b f(\mathbf{v}_b) \int d\Omega |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b| (\Delta \mathbf{v}_a) \frac{d\sigma}{d\Omega}, \quad (2.12)$$

$$\langle \Delta \mathbf{v}_a \Delta \mathbf{v}_a \rangle = \sum_b \int d\mathbf{v}_b f(\mathbf{v}_b) \int d\Omega |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b| (\Delta \mathbf{v}_a \Delta \mathbf{v}_a) \frac{d\sigma}{d\Omega}, \quad (2.13)$$

通过在质心系中引入如图 2 局部坐标系，局部坐标系的坐标基矢和实验室坐标基矢的关系为

$$\mathbf{e}'_1 = \frac{\mathbf{v}}{v}, \quad \mathbf{e}'_2 = \frac{\mathbf{e}_3 \times \mathbf{v}}{\sqrt{(v^{(1)})^2 + (v^{(2)})^2}}, \quad \mathbf{e}'_3 = \mathbf{e}'_1 \times \mathbf{e}'_2, \quad (2.14)$$

其中 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ 指实验室坐标基矢（固定坐标系，实验室坐标系和质心坐标系坐标基矢相同）， $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3$ 指局部坐标系基矢， $v^{(1)}, v^{(2)}$ 为相对速度 v 沿 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ 的分量。如图 2.2 以此计算局部坐标系中的相对速度改变量 Δv_L ，并求解立体角积分项，然

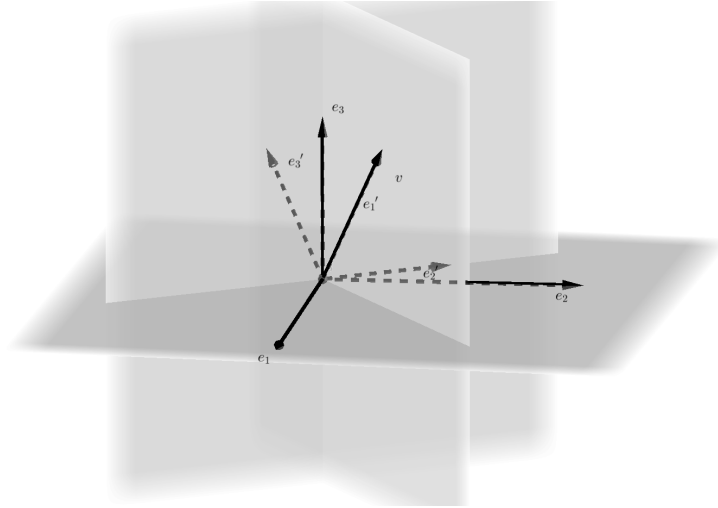


图 2.2 质心系中的局部坐标系与实验室坐标系基底的关系，实验室坐标和局部坐标都是直角坐标。

后在将结果转换回实验室坐标系下。根据卢瑟福散射公式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b_{\perp}^2}{4 \sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (2.15)$$

其中

$$b_{\perp} = \frac{z_a z_b e^2}{4\pi m_r \epsilon_0 v^2}, \quad (2.16)$$

z_a, z_b 为入射粒子和靶粒子的核电荷数， ϵ_0 为真空介电常数， v 为在无穷远处 a, b 类粒子的相对速度， $\mathbf{v} = \mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b$ ， m_r 为约化质量

$$m_r = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}, \quad (2.17)$$

带入局部坐标系求解, 再带回实验室坐标系, 最后得到的结果经过一定的截断^[67], 即得到摩擦系数 $\langle \Delta \mathbf{v}_a \rangle$ 和扩散系数 $\langle \Delta \mathbf{v}_a \Delta \mathbf{v}_a \rangle$

$$\langle \Delta \mathbf{v}_a \rangle = -\frac{z_a^2 z_b^2 \ln \Lambda}{4\pi n_b} \frac{n_b^2 e^4}{m_a^2 \epsilon_0^2} \frac{m_a}{m_r} \frac{\mathbf{v}}{v^3} = -\Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a}, \quad (2.18)$$

$$\langle \Delta \mathbf{v}_a \Delta \mathbf{v}_a \rangle = -\frac{z_a^2 z_b^2 \ln \Lambda}{4\pi n_b} \frac{n_b^2 e^4}{m_a^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{v} \left(I - \frac{\mathbf{v} \mathbf{v}}{v^2} \right) = \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathcal{G}_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a}, \quad (2.19)$$

其中

$$\mathcal{H}_a = \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v}, \quad (2.20)$$

$$\mathcal{G}_a = \sum_b \int d\mathbf{v}_b \mathbf{v} f_b(\mathbf{v}_b), \quad (2.21)$$

$$\Gamma_a = \frac{z_a^2 z_b^2 e^4}{4\pi \epsilon_0^2 m_a^2} \ln \Lambda, \quad (2.22)$$

$\ln \Lambda$ 为库仑对数, 在等离子体物理中将库仑对数看成与电子数密度、电子和离子温度以及离子质量数有关的常数。对于热电子-电子碰撞, 对应的库仑对数为^[68]

$$\begin{cases} \ln \Lambda = 23 - \ln(n_e^{1/2} T_e^{-3/2}) & T_e < 10eV, \\ \ln \Lambda = 24 - \ln(n_e^{1/2} T_e^{-1}) & T_e > 10eV. \end{cases} \quad (2.23)$$

对于热电子-离子碰撞, 有

$$\begin{cases} \ln \Lambda = 30 - \ln(n_e^{1/2} T_i^{-3/2} Z_i^{3/2} \hat{m}_i) & T_e < T_i \frac{m_e}{m_i}, \\ \ln \Lambda = 23 - \ln(n_e^{1/2} Z_i T_i^{-3/2}) & \frac{T_i m_e}{m_i} < T_e < 10 Z_i^2 eV, \\ \ln \Lambda = 24 - \ln(n_e^{1/2} T_e^{-1}) & T_i \frac{m_e}{m_i} < 10 Z_i^2 eV < T_e. \end{cases} \quad (2.24)$$

其中, n_e 和 n_i 的单位是 cm^{-3} , T_e, T_i 的单位是 eV , $\hat{m}_i = \frac{m_i}{m_p}$, m_i 表示离子质量, m_p 表示质子质量。将摩擦系数和扩散系数的具体表达式 (2.18), (2.19) 带入 FP 方程的表达式中, 即得到由 RMJ 势表示的 FP 方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = & -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \cdot \left(f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t - \Delta t) \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a} \right) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} : \left(f_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_a, t - \Delta t) \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathcal{G}_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \right), \end{aligned} \quad (2.25)$$

2.1.2 FP 方程与 Itô SDE 的随机等价性

FP 方程的碰撞积分和 Itô SDE 分别为

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c = \frac{\partial}{\partial v_i} \left(-P_i(\mathbf{v}) f + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_k} (Q_{ik}(\mathbf{v}) f) \right), \quad (2.26)$$

$$dv_i = F_i(\mathbf{v})dt + D_{ik}(\mathbf{v})dW_k, \quad (2.27)$$

其中 $P_i(\mathbf{v})$ 表示摩擦系数的第 i 个分量, Q_{ik} 表示扩散系数的第 ik 个分量, f 表示粒子的分布函数, $F_i(\mathbf{v}), D_{ik}(\mathbf{v})$ 是确定的函数, W_k 表示 Wiener 过程。FP 方程是描述粒子在阻力和随机力影响下速度概率分布函数时间演化的偏微分方程。而 Itô SDE 是微分方程, 在这个微分方程中含有一项或者多项随机过程, 因此其解也为随机过程。下面我们由描述粒子系随机过程的 SDE 出发, 得到粒子系速度概率分布函数随时间演化的 FP 方程。

定义无限小生成算符 $\mathcal{L}$ [69-70]

$$\mathcal{L}f(X_t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (\mathbb{E}[f(X_{t+\Delta t})|X_t = x] - p(x)), \quad (2.28)$$

其中 $\mathbb{E}[f(X_{t+\Delta t})|X_t = x]$ 表示当给定 $X_t = x$ 时, $X_{t+\Delta t}$ 的条件期望, 引入转移概率 $P_{t+\Delta t}(x|x')$, 表示随机过程从 (t', x') 转移到 (t, x) 的概率, 将条件期望 $\mathbb{E}[f(X_{t+\Delta t})|X_t = x]$ 可以用转移概率 $\mathbb{P}_{t,t'}(x|x')$ 来表示

$$\mathbb{E}[f(X_{t+\Delta t})|X_t = x] = \int f(y)\mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(x|x')dy, \quad (2.29)$$

将此方程带入无限小生成算符的表达式, 方程左右同时乘上 $P_{t,t'}(x|x')$ 并对 dx 积分, 得到

$$\begin{aligned} \int [\mathcal{L}f(x)]\mathbb{P}_{t,t'}(x|x')dx &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int \int f(y)\mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(x|x')d\mathbb{P}(x|x')dx - \int \mathbb{P}_{t,t'}f(x)dx \right] \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int f(y) \int \mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(y|x)\mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(x|x')dxdy - \int \mathbb{P}_{t,t'}f(x)dx \right], \end{aligned} \quad (2.30)$$

根据 Chapman-Kolmogorov 定理

$$\int \mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(y|x')dx = \mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(y|x'), \quad (2.31)$$

因此原式为

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int f(y) \int \mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(y|x')dy - \int \mathbb{P}_{t,t'}f(x)dx \right], \quad (2.32)$$

将第一项积分的积分变量 y 替换成 x , 则有

$$\begin{aligned} &\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\int f(y) \int \mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(y|x')dy - \int \mathbb{P}_{t,t'}f(x)dx \right] \\ &= \int f(x) \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} (\mathbb{P}_{t+\Delta t,t'}(x|x') - \mathbb{P}_{t,t'}(x|x'))dx \\ &= \int f(x)\partial_t \mathbb{P}_{t,t'}(x|x'), \end{aligned} \quad (2.33)$$

因此有

$$\int [\mathcal{L}f(x)]\mathbb{P}_{t,t'}(x|x')dx = \int f(x)\partial_t \mathbb{P}_{t,t'}(x|x')dx, \quad (2.34)$$

由此得到了 Kolmogorov 向后方程。如果我们使用 $\mathcal{L}$ 的伴随算子 $\mathcal{L}^\dagger$ ，并定义

$$\int [\mathcal{L}f(x)]\mathbb{P}_{t,t'}(x|x')dx = \int f(x)[\mathcal{L}^\dagger\mathbb{P}_{t,t'}(x|x')dx], \quad (2.35)$$

比较上面两式，我们得到

$$\partial_t \mathbb{P}_{t,t'}(x|x') = \mathcal{L}^\dagger \mathbb{P}_{t,t'}(x|x')dx, \quad (2.36)$$

将转移概率 $\mathbb{P}_{t,t'}(x|x')$ 简化为 $f(x,t) = \mathbb{P}_{t,t'}(x|x')$ ，则得到

$$\partial_t f(x,t) = \mathcal{L}^\dagger f(x,t), \quad (2.37)$$

这就是 Kolmogorov 向前方程，或者 FP 方程。只需根据具体的随机过程确定 $\mathcal{L}^\dagger$ 的表达式，就可以得到与此随机过程对应概率分布函数演化的 FP 方程的具体表达式。对于方程 (2.27) 所示的 Itô SDE，可以通过取 Itô 引理积分形式的期望来获得。Itô 引理是用来得到一个随机过程的时间依赖函数微分的恒等式，可以看成是随机微积分的链式法则。Itô 引理的表达式可以通过将 Itô SDE 通过 Taylor 展开到二阶，然后保留时间增量的一阶项和 Wiener 过程的二阶项来获得。下面我们先得到 Itô 引理，再通过 Itô 引理来获得 Itô SDE 所对应的最小生成算符，然后根据最小生成算符的伴随算子，最后得到与 Itô SDE 对应的概率分布函数演化的 FP 方程。

如果一个函数 $f(x,t)$ 是二阶可微的标量函数，它的 Taylor 级数展开为

$$df = \frac{\partial f}{\partial t}dt + \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}dx^2, \quad (2.38)$$

先将方程 (2.27) 换成一般的 Itô SDE 的形式

$$dX_t = \mu_t dt + \sigma_t dW_t, \quad (2.39)$$

再将方程代入，将 X_t 替换 x ，用 $\mu_t dt + \sigma_t dW_t$ 来替换 dx ，因此有

$$df = \frac{\partial f}{\partial t}dt + \frac{\partial f}{\partial x}(\mu_t dt + \sigma_t dW_t) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}d(\mu_t^2 dt^2 + \sigma_t^2 dW_t^2 + 2\mu_t dt \sigma_t dW_t), \quad (2.40)$$

在时间 $dt \rightarrow 0$ 的极限下， dt^2 和 $dt dW_t$ 趋于 0 的速度比 dW_t^2 快， dW_t^2 趋于 0 的速度为 $\mathcal{O}(dt)$ ，因此将含有 dt^2 和 $dt dW_t$ 的项都设为 0，将含有 dW_t^2 的项用 dt 替换（根据 Wiener 过程的方差），我们得到

$$df = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \mu_t \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\sigma_t^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)dt + \sigma_t \frac{\partial f}{\partial x}dW_t, \quad (2.41)$$

这就是 Itô 引理。由 Itô 引理得其积分形式为

$$f(X_t) = f(x_0) + \int_{t_0}^t \left[\mu(t', X_{t'}) \frac{\partial f(X_{t'})}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma(t', X_{t'})^2 \frac{\partial^2 f(X_{t'})}{\partial x^2} \right] dt' + \int_{t_0}^t \sigma(t', X_{t'}) \frac{\partial f(X_{t'})}{\partial x} dB_{t'}, \quad (2.42)$$

取该等式的平均并令 $t \rightarrow t_0$, 根据 Itô 过程具有连续轨迹, 并且假设 μ 和 σ 对 $(t', X_{t'})$ 是连续的, 得到最小生成算符的表达式

$$\mathcal{L}_t = \mu(t, x) \partial_x + \frac{\sigma^2(t, x)}{2} \partial_x^2, \quad (2.43)$$

根据最小生成算符伴随算子的定义, 利用分部积分得到

$$\mathcal{L}^\dagger = -\partial_x(\mu \cdot) + \partial_x^2\left(\frac{\sigma^2}{2} \cdot\right), \quad (2.44)$$

由此得 Itô 随机过程对应概率分布函数演化的 FP 方程的具体表达式为

$$\partial_t f(x, t) = -\partial_x(\mu(x, t) \cdot f(x, t)) + \partial_x^2\left(\frac{\sigma(x, t)^2}{2} f(x, t)\right), \quad (2.45)$$

再将系数 $\mu(x, t)$ 和 $\sigma(x, t)$ 用 $F_i(\mathbf{v})$ 和 $D_{ik}(\mathbf{v})$ 替换, 对比方程 (2.26) 我们得到, 当 $F_i(\mathbf{v})$, $D_{ik}(\mathbf{v})$ 和 $P_i(\mathbf{v})$, $Q_{ik}(\mathbf{v})$ 满足关系

$$\begin{cases} F_i(\mathbf{v}) &= P_i(\mathbf{v}), \\ D_{ik}(\mathbf{v}) &= Q_{ik}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{v}), \end{cases} \quad (2.46)$$

时, Itô 随机过程对应概率分布函数演化由 FP 方程描述, 即 FP 方程的解与 Itô SDE 的弱解是随机等价的。Itô SDE 的弱解是指在合适的概率空间, Wiener 过程下, 当粒子系综服从某一初始分布函数时, 构成整个系综中每一个粒子的坐标和速度的微观分布并不唯一, 而一旦确定初始时刻粒子系中每一个粒子的坐标和速度, 在相同的 Wiener 过程下, 每一时刻每个粒子的坐标和速度都是唯一的, 这些作为 Itô SDE 的强解, 由这些强解构成分布也作为 Itô SDE 的解, 对服从同一分布函数的不同微观分布, 在相同的 Wiener 过程下, 每一时刻的强解不同, 而由这些强解构成的分布则是相同的, 这里由强解所构成的分布就是 Itô SDE 的弱解。当只关心分布函数的演化时, FP 方程的解与 Itô SDE 的弱解是随机等价的^[16,70]。

2.2 Itô SDE 与 Stratonovich SDE 的等价性关系

SDE 有多种表示, 主要的三种形式为 Itô SDE, Stratonovich SDE 和 kientic SDE, 这三种表示形式的不同主要体现在对随机变量积分定义的不同, 但是, 这三种积分形式存在着等价性关系。下面先给出 Itô 积分和 Stratonovich 积分的定义, 再阐述 Itô SDE 和 Stratonovich SDE 的等价关系。Itô 积分的定义为

$$\int_a^b f(t, W_t) dW_t = \lim_{n \rightarrow 0} \sum_{k=0}^n f(t_{k+1}, W_{k+1})(W_{k+1} - W_k). \quad (2.47)$$

Stratonovich 积分的定义为

$$\int_a^b f(t, W_t) \circ dW_t = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^n f(\xi_{k+1}, W_{\xi_{k+1}})(W_{k+1} - W_k), \quad \xi_{k+1} = \frac{t_{k+1} + t_k}{2}, \quad (2.48)$$

为了区分 Itô 积分和 Stratonovich 积分, 我们用 " $\circ$ " 表示 Stratonovich 积分。对任意一个 SDE

$$dX_t = \mu(X_t, t)dt + \sigma(X_t, t)dW_t, \quad (2.49)$$

的解为

$$X_{t_1} = X_{t_0} + \int_{t_0}^{t_1} \mu(X_t, t)dt + \int_{t_0}^{t_1} \sigma(X_t, t)dW_t, \quad t_1 > t_0, \quad (2.50)$$

如果其中的积分使用的是 Itô 积分, 那么该 SDE 称为 Itô SDE; 如果使用的是 Stratonovich 积分, 那么该 SDE 称为 Stratonovich SDE。如果函数 $f(t, W_t)$ 满足条件^[21]

$$\int_{t_0}^{t_1} E[f(t, W_t)]^2 dt < \infty, \quad \int_{t_0}^{t_1} E\left[\frac{\partial f(t, W_t)}{\partial W_t}\right]^2 dt < \infty, \quad (2.51)$$

Stratonovich 积分的值等于 Itô 积分的值加上一个确定漂移项, 即

$$\int_{t_0}^{t_1} f(t, W_t) \circ dW_t = \int_{t_0}^{t_1} f(t, W_t)dW_t + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial f(t, W_t)}{\partial W_t} dt, \quad (2.52)$$

(2.51) 式是 (2.52) 式右边两项的收敛性条件。因此我们可以采用如下 Stratonovich SDE 来描述上述 Itô SDE 表示的随机过程

$$dX_t = \left(\mu(X_t, t) - \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma(X_t, t)}{\partial X_t} \sigma(X_t, t) \right) + \sigma(X_t, t) \circ dW_t, \quad (2.53)$$

因此, 如果

$$G_i = F_i - \frac{1}{2} D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_j}, \quad D = Q^{\frac{1}{2}}, \quad (2.54)$$

那么 Stratonovich SDE

$$dv_i = G_i(v)dt + D_{ik}(v) \circ dW_k, \quad (2.55)$$

与方程 (2.27) 是等价的^[13], 其中 $Q = \|Q_{ik}\|$, $D = \|D_{ik}\|$ 是对称非负定矩阵。

2.3 等价于 FP 方程的 Stratonovich SDE 的具体表达式

由方程 (2.20) 和方程 (2.21) 可知, Rosenbluth 势取决于背景分布函数 $f_b(\mathbf{v})$ 的选取。将摩擦系数 $\mathbf{P}$ 和扩散系数 $\mathbf{Q}$ 带入 (2.18) 和方程 (2.19), 则有

$$\mathbf{P} = \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a}, \quad (2.56)$$

$$\mathbf{Q} = \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathcal{G}_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a}, \quad (2.57)$$

由此我们可以分为两种情况, Lorentzian 等离子体和 Maxwellian 等离子体。

2.3.1 Lorentzian 等离子体中的 Stratonovich SDE

对 Lorentzian 等离子体, 其主要碰撞为电子-离子碰撞, 背景等离子体可以看成是冷的, 即背景热速度为 0m/s 并且背景粒子速度分布满足 $f_b(v_b) \propto \delta(v_b - v_{b0})$, 其中 v_{b0} 为背景等离子体平均速度。将分布函数带入 RMJ 势函数得

$$\mathcal{H}_a = \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{|\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_{b0}|}, \quad (2.58)$$

$$\mathcal{G}_a = \sum_b |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_{b0}|. \quad (2.59)$$

由此得到对应的摩擦系数和扩散系数 (2.56) 和 (2.57)^[13,67,71], 写成分量形式为

$$P_i = -\frac{z_a^2 z_b^2 \ln \Lambda}{4\pi n_b} \frac{n_b^2 e^4}{m_a^2 \epsilon_0^2} \frac{m_a}{m_r} \frac{v_i}{v^3} = -\Gamma_a n_b \frac{m_a}{m_r} \frac{v_i}{v^3}, \quad (2.60)$$

$$Q_{ik} = \frac{z_a^2 z_b^2 \ln \Lambda}{4\pi n_b} \frac{n_b^2 e^4}{m_a^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{v} [\delta_{ik} - \frac{v_i v_k}{v^2}] = \Gamma_a n_b \frac{v^2 \delta_{ik} - v_i v_k}{v^3}, \quad (2.61)$$

其中

$$m_r = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}, \quad (2.62)$$

m_a, m_b , 分别为入射粒子 a 、背景粒子 b 的质量, m_r 为粒子 a 和粒子 b 的折合质量, z_a, z_b 分别为 a, b 粒子的核电荷数, n_b 为 b 粒子的粒子数密度, $\ln \Lambda$ 表示库仑对数, $v = |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b|$ 为入射粒子 i 和背景粒子 b 的相对速度。将方程 (2.60) 和 (2.61) 带入方程 (2.54) 得

$$G_i = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{v_i}{v^3}, \quad (2.63)$$

$$D_{ik} = \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} (\delta_{ik} - \frac{v_i v_k}{v^2}). \quad (2.64)$$

带入 Stratonovich SDE(2.55) 得

$$dv_{ai} = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{v_i}{v^3} dt + \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} (\delta_{ik} - \frac{v_i v_k}{v^2}) \circ dW_k, \quad (2.65)$$

即

$$d\mathbf{v}_a = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{\mathbf{v}}{v^3} dt - \Omega(v) \mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}). \quad (2.66)$$

可以拓展到外场情况得

$$d\mathbf{v}_a = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{\mathbf{v}}{v^3} - \Omega(v) \mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}) + \frac{\mathbf{F}_L dt}{m_a}, \quad (2.67)$$

其中 $\mathbf{F}_L$ 为洛伦兹力, 并有 $\Omega(v) = \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{|v|^5}}$.

2.3.2 Maxwellian 等离子体中的 Stratonovich SDE

对于更为一般的情况, 是指当背景粒子为漂移 Maxwellian 分布, 此时对背景粒子的积分可以使用误差函数来近似处理。则有

$$f_b(\mathbf{v}) = \frac{n_b}{(2\pi)^{3/2} v_{Tb}^3} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}}_b)^2}{2v_{Tb}^2}\right), \quad v_{Tb} = \sqrt{\frac{T_b}{m_b}}. \quad (2.68)$$

其中 n_b 为背景粒子密度, $\mathbf{v}_b$ 表示背景粒子的速度, $\bar{\mathbf{v}}_b$ 为平均速度, v_T 为背景粒子的热速度, T_b 为背景粒子的温度。将方程 (2.68) 带入方程 (2.20)-(2.21) 得用误差函数表示的 Rosenbluth 势

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_a(\mathbf{v}_a) &= \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \int d\mathbf{v}_b \frac{n_b}{(2\pi)^{3/2} v_{Tb}^3} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}}_b)^2}{2v_{Tb}^2}\right) \frac{1}{|\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b|} \\ &= \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_b} n_b \left(\frac{1}{2\pi v_{Tb}^2}\right)^{3/2} \int d\mathbf{v}_b \exp\left(-\frac{(\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}}_b)^2}{2v_{Tb}^2}\right) \frac{1}{|\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b|}. \end{aligned} \quad (2.69)$$

注意到

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{v}_b \exp\left(-\frac{(\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}}_b)^2}{2v_{Tb}^2}\right) \frac{1}{|\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b|} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d(\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}}_b) \exp\left(-\frac{(\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}}_b)^2}{2v_{Tb}^2}\right) \frac{1}{|\mathbf{v}_a - \bar{\mathbf{v}}_b - (\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}}_b)|} \\ &= \frac{1}{|\mathbf{v}_a - \bar{\mathbf{v}}_b|} (2v_{Tb}^2 \pi)^{3/2} \Phi\left(\frac{|\mathbf{v}_a - \bar{\mathbf{v}}_b|}{\sqrt{2}v_{Tb}}\right). \end{aligned} \quad (2.70)$$

其中 Φ 为误差函数, 有

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy. \quad (2.71)$$

$$\Phi'(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}, \quad (2.72)$$

并令 $\tilde{\mathbf{v}}_a = \mathbf{v}_a - \bar{\mathbf{v}}_b$, 带入上式得

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_a(\mathbf{v}_a) &= \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_b} n_b \left(\frac{1}{2\pi v_{Tb}^2}\right)^{3/2} \frac{1}{\tilde{v}_a} (2v_{Tb}^2 \pi)^{3/2} \Phi\left(\frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2}v_{Tb}}\right) \\ &= \frac{m_a + m_b}{m_b} n_b \frac{1}{\tilde{v}_a} \Phi\left(\frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2}v_{Tb}}\right). \end{aligned} \quad (2.73)$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}_a(\mathbf{v}_a) &= \sum_b \int d\mathbf{v}_b v f(\mathbf{v}_b) \\
 &= \sum_b \int d\mathbf{v}_b \frac{n_b}{(2\pi)^{3/2} v_{Tb}^3} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v}_b - \bar{\mathbf{v}})^2}{2v_{Tb}^2}\right) |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b| \\
 &= n_b \tilde{v}_a \left(\Phi\left(\frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2}v_{Tb}}\right) - \Psi\left(\frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2}v_{Tb}}\right) \right) + n_b 2v_{Tb}^2 \frac{1}{\tilde{v}_a} \Phi\left(\frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2}v_{Tb}}\right). \quad (2.74)
 \end{aligned}$$

令

$$\eta = \frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2}v_{Tb}}, \quad (2.75)$$

则有

$$\begin{aligned}
 \Psi(\eta) &= -\frac{1}{2} \frac{d(\Phi(\eta)/\eta)}{d\eta} \\
 &= \frac{1}{2} \frac{1}{\eta^2} \Phi(\eta) - \frac{1}{2} \frac{1}{\eta} \Phi'(\eta), \quad (2.76)
 \end{aligned}$$

原式有

$$\mathcal{G} = n_b \sqrt{2}v_{Tb} \left\{ \eta [\Phi(\eta) - \Psi(\eta)] + \frac{1}{\eta} \Phi(\eta) \right\}. \quad (2.77)$$

则有其中 v_a 表示入射粒子的速度大小，带入 $\mathbf{P}, Q$ 有

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P} &= \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a} \\
 &= -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} \tilde{\mathbf{v}}_a. \quad (2.78)
 \end{aligned}$$

其中

$$\mathcal{N} = 2\Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \frac{\Psi(\eta)}{\eta}, \quad (2.79)$$

$$\begin{aligned}
 Q &= \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathcal{G}_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \\
 &= \Gamma_a \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \left[n_b \sqrt{2}v_{Tb} \left\{ \eta [\Phi(\eta) - \Psi(\eta)] + \frac{1}{\eta} \Phi(\eta) \right\} \right] \\
 &= \Gamma_a n_b \sqrt{2}v_{Tb} \left\{ \left[\frac{2}{\eta^3} \Phi(\eta) + 2\left(1 - \frac{1}{\eta^2}\right) \Phi'(\eta) + \left(\eta + \frac{1}{\eta}\right) \Phi''(\eta) \right] \right. \\
 &\quad \left. - 2\Psi'(\eta) - \eta\Psi''(\eta) \right] \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \eta \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \eta \\
 &\quad + \left[\left(1 - \frac{1}{\eta^2}\right) \Phi(\eta) + \left(\eta + \frac{1}{\eta}\right) \Phi'(\eta) - \Psi(\eta) - \eta\Psi'(\eta) \right] \frac{\partial^2 \eta}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \right\}, \quad (2.80)
 \end{aligned}$$

由于

$$\eta = \frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2}v_{Tb}}, \quad (2.81)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \eta = \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a}, \quad (2.82)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \eta \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \eta = \frac{\tilde{v}_a}{2v_{Tb}^2} \frac{1}{\tilde{v}_a^3} \tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a = \frac{\eta}{\sqrt{2}v_{Tb}} \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^3}, \quad (2.83)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \eta \right) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \left(\frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \left(\frac{1}{\tilde{v}_a} \right) \tilde{\mathbf{v}}_a + \frac{1}{\tilde{v}_a} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \tilde{\mathbf{v}}_a \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \left(-\frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^3} + \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathbf{I} \right). \end{aligned} \quad (2.84)$$

带入 (2.80) 得

$$\begin{aligned} Q &= \Gamma_a n_b v_{Tb} \left\{ \left[\frac{2}{\eta^2} \Phi(\eta) + 2\left(\eta - \frac{1}{\eta}\right) \Phi'(\eta) + (\eta^2 + 1) \Phi''(\eta) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - 2\eta \Psi'(\eta) - \eta^2 \Psi''(\eta) \right] \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \left(\frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^3} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left[\left(1 - \frac{1}{\eta^2}\right) \Phi(\eta) + \left(\eta + \frac{1}{\eta}\right) \Phi'(\eta) - \Psi(\eta) - \eta \Psi'(\eta) \right] \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \left(-\frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^3} + \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathbf{I} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.85)$$

由于

$$\Phi'(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-\eta^2), \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} \Phi''(\eta) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} (-2\eta) \exp(-\eta^2) \\ &= -2\eta \Phi'(\eta). \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\Psi(\eta) = \frac{1}{2} \frac{1}{\eta^2} \Phi(\eta) - \frac{1}{2} \frac{1}{\eta} \Phi'(\eta), \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned} \Psi'(\eta) &= -\frac{1}{\eta^3} \Phi(\eta) + \frac{1}{2} \frac{1}{\eta^2} \Phi'(\eta) + \frac{1}{2} \frac{1}{\eta^2} \Phi'(\eta) - \frac{1}{2} \frac{1}{\eta} \Phi''(\eta) \\ &= -\frac{1}{\eta^3} \Phi(\eta) + \frac{1}{\eta^2} \Phi'(\eta) + \Phi'(\eta) \\ &= -\frac{2}{\eta} \left[\frac{1}{2} \frac{1}{\eta^2} \Phi(\eta) - \frac{1}{2} \frac{1}{\eta} \Phi'(\eta) \right] + \Phi'(\eta) \\ &= -\frac{2}{\eta} \Psi(\eta) + \Phi'(\eta), \end{aligned} \quad (2.89)$$

$$\begin{aligned}
 \Psi''(\eta) &= \frac{2}{\eta^2}\Psi(\eta) - \frac{2}{\eta}\Psi'(\eta) + \Phi''(\eta) \\
 &= \frac{2}{\eta^2}\Psi(\eta) + \frac{4}{\eta^2}\Psi(\eta) - \frac{2}{\eta}\Phi'(\eta) - 2\eta\Phi'(\eta) \\
 &= \frac{6}{\eta^2}\Psi(\eta) - \left(\frac{2}{\eta} + 2\eta\right)\Phi'(\eta), \tag{2.90}
 \end{aligned}$$

带入 (2.85) 第一项系数为

$$\begin{aligned}
 &\frac{2}{\eta^2}\Phi(\eta) + 2\left(\eta - \frac{1}{\eta}\right)\Phi'(\eta) + (\eta^2 + 1)\Phi''(\eta) - 2\eta\Psi'(\eta) - \eta^2\Psi''(\eta) \\
 &= \frac{2}{\eta^2}\Phi(\eta) + 2\left(\eta - \frac{1}{\eta}\right)\Phi'(\eta) - 2\eta(\eta^2 + 1)\Phi'(\eta) - 2\eta\left[-\frac{2}{\eta}\Psi(\eta) + \Phi'(\eta)\right] \\
 &\quad - \eta^2\left(\frac{6}{\eta^2}\Psi(\eta) - \left(\frac{2}{\eta} + 2\eta\right)\Phi'(\eta)\right) \\
 &= 4\left[\frac{1}{2}\frac{1}{\eta^2}\Phi(\eta) - \frac{1}{2}\frac{1}{\eta}\Phi'(\eta)\right] + 4\Psi(\eta) - 6\Psi(\eta) \\
 &= 2\Psi(\eta). \tag{2.91}
 \end{aligned}$$

第二项的系数为

$$\begin{aligned}
 &\left(1 - \frac{1}{\eta^2}\right)\Phi(\eta) + \left(\eta + \frac{1}{\eta}\right)\Phi'(\eta) - \Psi(\eta) - \eta\Psi'(\eta) \\
 &= \Phi(\eta) - \frac{1}{\eta^2}\Phi(\eta) + \frac{1}{\eta}\Phi'(\eta) + \eta\Phi'(\eta) - \Psi(\eta) - \eta\Psi'(\eta) \\
 &= \Phi(\eta) - 2\Psi(\eta) + \eta\Phi'(\eta) - \Psi(\eta) - \eta\left[-\frac{2}{\eta}\Psi(\eta) + \Phi'(\eta)\right] \\
 &= \Phi(\eta) - 2\Psi(\eta) + \eta\Phi'(\eta) - \Psi(\eta) + 2\Psi(\eta) - \eta\Phi'(\eta) \\
 &= \Phi(\eta) - \Psi(\eta), \tag{2.92}
 \end{aligned}$$

因此有

$$Q = \Gamma_a n_b \sqrt{2}v_T \left\{ 2\Psi(\eta) \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \left(-\frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^3} \right) + [\Phi(\eta) - \Psi(\eta)] \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \left(-\frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^3} + \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathbf{I} \right) \right\}, \tag{2.93}$$

令

$$\mathcal{M} = \Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2}v_{Tb}} \frac{\Phi(\eta) - \Psi(\eta)}{\eta}, \tag{2.94}$$

则有

$$Q = [\mathcal{M}\mathbf{I} - (\mathcal{M} - \mathcal{N}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^2}]. \tag{2.95}$$

写为分量形式有

$$Q_{ik} = \mathcal{M}\delta_{ik} - (\mathcal{M} - \mathcal{N}) \frac{\tilde{v}_{ai}\tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2}, \tag{2.96}$$

则有

$$D_{ik} = \mathcal{M}^{1/2} \delta_{ik} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2}, \quad (2.97)$$

$$G_i = P_i - \frac{1}{2} D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}}, \quad (2.98)$$

$$\begin{aligned} D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} &= [\mathcal{M}^{1/2} \delta_{jk} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{aj} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2}] \left\{ \frac{\partial}{\partial v_{aj}} \mathcal{M}^{1/2} \delta_{ik} \right. \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) [(\delta_{ij} \tilde{v}_{ak} + \delta_{jk} \tilde{v}_{ai}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \\ &\quad \left. - 2 \frac{1}{\tilde{v}_a^4} \tilde{v}_{aj} \tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v_{ai}} \mathcal{M} + \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2} \frac{\partial}{\partial v_{ak}} (\mathcal{N} - \mathcal{M}) \right] - 2 [\mathcal{M} - (\mathcal{M} \mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2}, \end{aligned} \quad (2.99)$$

因为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \mathcal{M} &= \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \left[\Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2} v_{Tb}} \frac{\Phi(\eta) - \Psi(\eta)}{\eta} \right] \\ &= \Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2} v_{Tb}} \left[-\frac{1}{\eta^2} \Phi(\eta) + \frac{1}{\eta^2} \Psi(\eta) + \frac{1}{\eta} \Phi'(\eta) - \frac{1}{\eta} \Psi'(\eta) \right] \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \eta \\ &= \Gamma_a n_b \frac{1}{2 v_{Tb}^2} \frac{1}{\eta^2} [3 \Psi(\eta) - \Phi(\eta)] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} \\ &= \mathcal{M}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a}. \end{aligned} \quad (2.100)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \mathcal{N} &= \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \left[2 \Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2} v_{Tb}} \frac{\Psi(\eta)}{\eta} \right] \\ &= 2 \Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2} v_{Tb}} \left[-\frac{1}{\eta^2} \Psi(\eta) + \frac{1}{\eta} \Psi'(\eta) \right] \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \eta \\ &= 2 \Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2} v_{Tb}} \left\{ -\frac{1}{\eta^2} \Psi(\eta) + \frac{1}{\eta} \left[-\frac{2}{\eta} \Psi(\eta) + \Phi'(\eta) \right] \right\} \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \eta \\ &= 2 \Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2} v_{Tb}} \left\{ -\frac{1}{\eta^2} \Psi(\eta) + \frac{1}{\eta} \left[-\frac{2}{\eta} \Psi(\eta) + \frac{1}{\eta} \Phi(\eta) - 2 \eta \Psi(\eta) \right] \right\} \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \eta \\ &= 2 \Gamma_a n_b \frac{1}{2 v_{Tb}^2} \frac{\Phi(\eta) - (2 \eta^2 + 3) \Psi(\eta)}{\eta^2} \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} \\ &= \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

带入方程得

$$\begin{aligned}
 D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} &= \frac{1}{2} \frac{1}{\tilde{v}_a} [\mathcal{M}' \tilde{v}_{ai} + \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2} \tilde{v}_{ak} (\mathcal{N}' - \mathcal{M}')] \\
 &\quad - 2[\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2} \\
 &= \frac{1}{2} \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} - 2[\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2}
 \end{aligned} \tag{2.102}$$

因此有

$$\begin{aligned}
 G_i &= P_i - \frac{1}{2} D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_j} \\
 &= -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_T^2} \mathcal{N} \tilde{v}_{ai} \\
 &\quad - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \tilde{v}_{ai} + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2}.
 \end{aligned} \tag{2.103}$$

带入方程 (2.55) 得

$$\begin{aligned}
 dv_{ai} &= G_i(\mathbf{v})dt + D_{ik}(\mathbf{v}) \circ dW_k \\
 &= -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} \tilde{v}_{ai} dt \\
 &\quad - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \tilde{v}_{ai} dt + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2} dt \\
 &\quad + \mathcal{M}^{1/2} dW_i - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak} dW_k}{\tilde{v}_a^2},
 \end{aligned} \tag{2.104}$$

写成矢量形式有

$$\begin{aligned}
 d\mathbf{v} &= -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} \tilde{\mathbf{v}}_a dt \\
 &\quad - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \tilde{\mathbf{v}}_a dt + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a}{\tilde{v}_a^2} dt \\
 &\quad + \mathcal{N}^{1/2} d\mathbf{W} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times d\mathbf{W})}{\tilde{v}_a^2}.
 \end{aligned}$$

因为

$$\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times \tilde{\mathbf{v}}_a) = 0,$$

因此有

$$\begin{aligned}
 d\mathbf{v} &= [-\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \\
 &\quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2}] \tilde{\mathbf{v}}_a dt \\
 &\quad + \mathcal{N}^{1/2} d\mathbf{W} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times d\mathbf{W})}{\tilde{v}_a^2}.
 \end{aligned} \tag{2.105}$$

对含外场的情况, 有

$$\begin{aligned}
 d\mathbf{v} = & \left[-\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\
 & + \left. [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \right] \tilde{\mathbf{v}}_a dt \\
 & + \mathcal{N}^{1/2} d\mathbf{W} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times d\mathbf{W})}{\tilde{v}_a^2} + \frac{\mathbf{F}_L dt}{m_a}. \quad (2.106)
 \end{aligned}$$

2.4 Itô SDE 与 kinetic SDE 的随机等价性

SDE 有常用的三种形式, 分别为 Ito, Stratonovich 以及 kinetic 形式^[64-65]。采用 kinetic 形式可以得到对应的数值积分方法^[72]。通过 FP 方程与 Ito SDE 的随机等价性, Ito SDE 与 kinetic SDE 的等价性关系, 得到等价于 RMJ 下 Fokker-Planck 方程的 kinetic SDE, 并就 Lorentzian 等离子体和 Maxwellian 等离子体给出具体的表达式。采用 Itô 积分对 kinetic 积分进行定义^[72]

$$\int B(\mathbf{x}) \diamond d\mathbf{W} := \int B(\mathbf{x}) d\mathbf{W} + \frac{1}{2} \int \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{x}) \right] dt, \quad (2.107)$$

我们可以得到采用 kinetic 积分表示等价于 RMJ 表示 Fokker-Planck 方程的 kinetic SDE, 有

$$\begin{aligned}
 dv_{ai} &= F_i(\mathbf{v}) dt + D_{ik}(\mathbf{v}) dW_k \\
 &= F_i(\mathbf{v}) dt + D_{ik}(\mathbf{v}) \diamond dW_k - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} \cdot (D_{ik}(\mathbf{v}) D_{kj}(\mathbf{v})) dt \\
 &= \left[F_i(\mathbf{v}) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} Q_{ij}(\mathbf{v}) \right] dt + D_{ik}(\mathbf{v}) \diamond dW_k \\
 &= K_i(\mathbf{v}) dt + D_{ik}(\mathbf{v}) \diamond dW_k. \quad (2.108)
 \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
 K_i &= F_i - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} Q_{ij} \\
 &= F_i - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (D_{ik} D_{kj}) \\
 &= F_i - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} D_{kj} - \frac{1}{2} D_{ik} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}}. \quad (2.109)
 \end{aligned}$$

2.5 等价于 FP 方程的 kinetic SDE 的具体表达式

2.5.1 Lorentzian 等离子体中的 kinetic SDE

对于 Lorentzian 等离子体, 分布函数满足 $f_b(v_b) \propto \delta(v_b - v_{b0})$, $\mathbf{P}, \mathbf{Q}$ 满足方程 (2.60)-(2.61)。将方程 (2.56)-(2.57) 带入方程 (2.46) 和 (2.109) 得

$$D_{ik} = \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} (\delta_{ik} - \frac{v_i v_k}{v^2}). \quad (2.110)$$

$$K_i = F_i - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} D_{kj} - \frac{1}{2} D_{ik} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}}, \quad (2.111)$$

$$\frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} = \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v^5}} [\frac{1}{2} \delta_{ik} v_j - \delta_{ij} v_k + \frac{3}{2} \frac{v_j v_i v_k}{v^2}]. \quad (2.112)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}} &= \frac{\partial}{\partial v_{aj}} [\sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} (\delta_{kj} - \frac{v_k v_j}{v^2})] \\ &= \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\frac{1}{\sqrt{v}}) (\delta_{kj} - \frac{v_k v_j}{v^2}) + \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\delta_{kj} - \frac{v_k v_j}{v^2}), \end{aligned} \quad (2.113)$$

$$\frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\frac{1}{\sqrt{v}}) = -\frac{1}{2} v^{-\frac{5}{2}} v_j, \quad (2.114)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\delta_{kj} - \frac{v_k v_j}{v^2}) &= -\frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\frac{v_k v_j}{v^2}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial v_{aj}} [(v_{ak} - v_{b0k})(v_{aj} - v_{b0j})] \frac{1}{v^2} - \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\frac{1}{v^2}) v_k v_j \\ &= -[\delta_{jk}(v_{aj} - v_{b0j}) + (v_{ak} - v_{b0k})] \frac{1}{v^2} \\ &\quad + v^{-4} [2\delta_{ij} v_{ai} - 2\delta_{ij} v_{b0i}] v_k v_j \\ &= -[\delta_{jk} v_j + v_k] \frac{1}{v^2} + 2 \frac{1}{v^4} v_i v_i v_k, \end{aligned} \quad (2.115)$$

带入 $\frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}}$ 得

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}} &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} v^{-\frac{5}{2}} v_j (\delta_{kj} - \frac{v_k v_j}{v^2}) + \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} \{ -[\delta_{jk} v_j + v_k] \frac{1}{v^2} + 2 \frac{1}{v^4} v_i v_i v_k \} \\ &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} v^{-\frac{5}{2}} (v_k - v_k) + \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} \{ -\frac{2v_k}{v^2} + \frac{2v_k}{v^2} \} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.116)$$

则有

$$\begin{aligned} K_i &= F_i - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} D_{kj} \\ &= -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{v_i}{v^3}. \end{aligned} \quad (2.117)$$

带入 kinetic SDE 方程 (2.108) 有

$$dv_{ai} = -\Gamma_a n_b \frac{m_a}{m_b} \frac{v_i}{v^3} dt + \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{v}} \left(\delta_{ik} - \frac{v_i v_k}{v^2} \right) \diamond dW_k, \quad (2.118)$$

即

$$d\mathbf{v}_a = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{\mathbf{v}}{v^3} - \Omega(v) \mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}), \quad (2.119)$$

2.5.2 Maxwellian 等离子体中的 kinetic SDE

对 Maxwellian 等离子体, 背景等离子体分布为方程 (2.68), 对应的 RMJ 势函数为方程 (2.73)-(2.77)。将方程 (2.73)-(2.77) 带入方程 (2.56)-(2.57) 得对应摩擦系数 $\mathbf{P}$ 和扩散系数 $\mathbf{Q}$ 的表达式, 即方程 (2.78)-(2.95)。写为分量形式有

$$P_i = -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} \tilde{v}_{ai}, \quad (2.120)$$

$$Q_{ik} = \mathcal{M} \delta_{ik} - (\mathcal{M} - \mathcal{N}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2}, \quad (2.121)$$

其中 $\mathcal{M}, \mathcal{N}$ 满足方程 (2.79)-(2.94)。将方程 (2.120) 和 (2.121) 带入方程 (2.46) 和 (2.109) 得

$$D_{ik} = \mathcal{M}^{1/2} \delta_{ik} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2}, \quad (2.122)$$

$$F_i = P_i, \quad (2.123)$$

$$K_i = F_i - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} D_{kj} - \frac{1}{2} D_{ik} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}}, \quad (2.124)$$

$$\frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} D_{kj} = \frac{1}{2} \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} - 2[\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2}, \quad (2.125)$$

$$\begin{aligned}
 D_{ik} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}} &= [\mathcal{M}^{1/2} \delta_{ik} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2}] \{ \frac{\partial}{\partial v_{aj}} \mathcal{M}^{1/2} \delta_{kj} \\
 &\quad - \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ak} \tilde{v}_{aj}}{\tilde{v}_a^2} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) [(\delta_{kj} \tilde{v}_{aj} + \tilde{v}_{ak}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \\
 &\quad - 2 \frac{1}{\tilde{v}_a^4} \tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj} \tilde{v}_{ak}] \} \\
 &= \mathcal{M}^{1/2} \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{M}^{1/2} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj}}{\tilde{v}_a^2} \\
 &\quad - \mathcal{M}^{1/2} (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) [(\tilde{v}_{ai} + \tilde{v}_{aj}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} - 2 \frac{1}{\tilde{v}_a^4} \tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj} \tilde{v}_{ai}] \\
 &\quad - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj}}{\tilde{v}_a^2} \frac{\partial}{\partial v_{aj}} \mathcal{M}^{1/2} \\
 &\quad + (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\partial}{\partial v_{aj}} (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj} \tilde{v}_{ak} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^4} \\
 &\quad + (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2})^2 [(\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj} \tilde{v}_{aj} + \tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak} \tilde{v}_{ak}) \frac{1}{\tilde{v}_a^4} \\
 &\quad - 2 \frac{1}{\tilde{v}_a^6} \tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj} \tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak} \tilde{v}_{ak}] \\
 &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \mathcal{M} - \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{aj}}{2 \tilde{v}_a^2} \left[\frac{\partial}{\partial v_{aj}} \mathcal{M} - \frac{\partial}{\partial v_{aj}} \mathcal{N} \right]. \tag{2.126}
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial v_{ai}} \mathcal{M} = \mathcal{M}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a}, \tag{2.127}$$

$$\frac{\partial}{\partial v_{ai}} \mathcal{N} = \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a}, \tag{2.128}$$

其中

$$\mathcal{M}' = \Gamma_a n_b \frac{1}{2 v_{Tb}^2} \frac{1}{\eta^2} [3\Psi(\eta) - \Phi(\eta)], \tag{2.129}$$

$$\mathcal{N}' = \Gamma_a n_b \frac{1}{v_{Tb}^2} \frac{\Phi(\eta) - (2\eta^2 + 3)\Psi(\eta)}{\eta^2}, \tag{2.130}$$

则有

$$D_{ik} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}} = \frac{1}{2} \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a}, \tag{2.131}$$

因此有

$$\begin{aligned}
 K_i &= F_i - \frac{1}{2} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}} D_{kj} - \frac{1}{2} D_{ik} \frac{\partial D_{kj}}{\partial v_{aj}} \\
 &= -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2 v_{Tb}^2} \mathcal{N} \tilde{v}_{ai} - \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} - 2[\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2} \right] \\
 &\quad - \frac{1}{4} \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} \\
 &= -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2 v_{Tb}^2} \mathcal{N} \tilde{v}_{ai} - \frac{1}{2} \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2}. \tag{2.132}
 \end{aligned}$$

将方程 (2.132) 代入方程 (2.108) 得

$$\begin{aligned} dv_{ai} &= K_i dt + D_{ik} \diamond dW_k \\ &= -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} \tilde{v}_{ai} dt - \frac{1}{2} \mathcal{N}' \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a} dt + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{\tilde{v}_{ai}}{\tilde{v}_a^2} dt \\ &\quad + \mathcal{M}^{1/2} \diamond dW_i - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{v}_{ai} \tilde{v}_{ak}}{\tilde{v}_a^2} \diamond dW_k. \end{aligned} \quad (2.133)$$

即

$$\begin{aligned} d\mathbf{v} &= \left\{ -\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{2} \mathcal{N}' \frac{1}{\tilde{v}_a} + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \right\} \tilde{\mathbf{v}}_a dt \\ &\quad + \mathcal{N}^{1/2} \diamond d\mathbf{W} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times d\mathbf{W})}{\tilde{v}_a^2}. \end{aligned} \quad (2.134)$$

当系统中漂移项来源于势函数的梯度和漂移张量或者迁移张量时, 即 $\mathbf{K}(\mathbf{v})$ 具有如下形式

$$\mathbf{K}(\mathbf{v}) = -\frac{1}{2} \mathbf{Q}(\mathbf{v}) \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \phi(\mathbf{v}, t) \right], \quad (2.135)$$

方程 (2.108) 的稳态分布为

$$f(\mathbf{v}) \approx \exp[-\phi(\mathbf{v})], \quad (2.136)$$

在已知 $\mathbf{K}(\mathbf{v}), \mathbf{Q}(\mathbf{v})$ 时, 我们也许可以通过

$$\phi(\mathbf{v}, t) = -2 \int \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{v}) \mathbf{K}(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad (2.137)$$

由于 $\mathbf{Q}(\mathbf{v}), \mathbf{K}(\mathbf{v})$ 表达式比较复杂, 对其积分过程也较难, 我们将在之后的研究中进行讨论。

2.6 任意分布下 Stratonovich SDE 的表达式

FP 方程的碰撞积分和 Itô SDE 分别为

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial f_a}{\partial t} \right)_c &= \frac{\partial}{\partial v_{ai}} \left(-P_i(\mathbf{v}) f_a + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial v_{ak}} Q_{ik}(\mathbf{v}) f_a \right), \\ dv_{ai} &= F_i(\mathbf{v}) dt + D_{ik}(\mathbf{v}) dW_k, \end{cases} \quad (2.138)$$

式中 $P_i(\mathbf{v})$ 表示摩擦系数的第 i 个分量, Q_{ik} 表示扩散系数第 ik 个分量, f_a 表示粒子 a 的分布函数, $F_i(\mathbf{v}), D_{ik}(\mathbf{v})$ 是确定性的函数, W_k 表示 Wiener 过程。当 $F_i(\mathbf{v}), D_{ik}(\mathbf{v})$ 和 $P_i(\mathbf{v}), Q_{ik}(\mathbf{v})$ 满足关系

$$\begin{cases} F_i(\mathbf{v}) &= P_i(\mathbf{v}), \\ D_{ik}(\mathbf{v}) &= Q_{ik}^{1/2}(\mathbf{v}), \end{cases} \quad (2.139)$$

时, FP 方程所得分布函数的解与 Itô SDE 的弱解是等价的。对于 Stratonovich SDE

$$dv_{ai} = G_i(\mathbf{v})dt + D_{ik}(\mathbf{v}) \circ dW_k, \quad (2.140)$$

当方程系数满足

$$G_i = F_i - \frac{1}{2} D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}}, \quad (2.141)$$

对于 RMJ 势表示下的 FP 方程, 其摩擦系数 $\mathbf{P}$ 和扩散系数 $\mathbf{Q}$ 分别为

$$\mathbf{P} = \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a}, \quad (2.142)$$

$$\mathbf{Q} = \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathcal{G}_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a}, \quad (2.143)$$

式中

$$\mathcal{H}_a(v) = \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v}, \quad (2.144)$$

$$\mathcal{G}_a(v) = \sum_b \int d\mathbf{v}_b v f_b(\mathbf{v}_b), \quad (2.145)$$

$$\Gamma_a = \frac{z_a^2 z_b^2 e^4}{4\pi \epsilon_0^2 m_a^2} \ln \Lambda, \quad (2.146)$$

在一般情况下, $\mathcal{H}_a$ 和 $\mathcal{G}_a$ 的值需要由对应的积分决定。 $v = |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b|$, 而这个积分, 根据分布函数的具体形式采用不同的数值方式进行近似。背景粒子分布函数的信息被涵盖在 $\mathcal{H}_a$ 和 $\mathcal{G}_a$ 中, 因此也被涵盖在 $\mathbf{P}$, $\mathbf{Q}$ 中。对背景粒子任意分布函数, 我们假设积分和微分可以调换顺序, 则有

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a} \\ &= \Gamma_a \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_a} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \frac{1}{v} \\ &= -\Gamma_a \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_a} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{\mathbf{v}}{v^3}, \end{aligned} \quad (2.147)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} &= \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathcal{G}_a(v)}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \\ &= \Gamma_a \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \sum_b \int d\mathbf{v}_b v f_b(\mathbf{v}_b) \right) \\ &= \Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{\mathbf{I}}{v} - \Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v} \frac{\mathbf{v} \mathbf{v}}{v^2}, \end{aligned} \quad (2.148)$$

则有

$$Q_{ik} = \Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v} \delta_{ik} - \Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v} \frac{v_i v_k}{v^2}, \quad (2.149)$$

SDE 扩散系数 D_{ik} 和 FP 方程扩散系数 Q_{ik} 满足方程 (2.139), 但是在已知 FP 扩散系数求 SDE 扩散系数 D_{ik} 时, 所得 D_{ik} 并不是唯一的。对扩散矩阵 Q_{ik} 的分解主要可以分为两种方法, 一种是通过特征向量和特征值的求解, 来得到一个对称矩阵, 另一种是通过 Cholesky 分解得到下三角矩阵。

2.6.1 通过求解特征向量和特征值来分解扩散矩阵 Q_{ik}

基本思路: 对扩散矩阵求特征向量和特征值, 我们可以得到对角矩阵 C_1 和正交矩阵 P_1 , 满足

$$Q = P_1^T C_1 P_1, \quad (2.150)$$

其中

$$C_1 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}, \quad (2.151)$$

$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 为特征值, P_1 为对应的特征向量矩阵。令

$$C_2 = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\lambda_3} \end{bmatrix}, \quad (2.152)$$

则有

$$\begin{aligned} Q &= P_1^T C_2^2 P_1 \\ &= P_1^T C_2 P_1 P_1^T C_2 P_1 \\ &= D^2, \end{aligned} \quad (2.153)$$

因此, 我们可以得到分解后的矩阵 D 满足

$$D = P_1^T C P_1. \quad (2.154)$$

所以, 求解对称矩阵 D 的基本思路为先求解出 Q 对应的特征值矩阵 C_1 和特征向量矩阵 P_1 , 将特征值矩阵求根得到 C_2 , 然后将特征向量矩阵 P_1 作用在 C_2 上得到分解后的矩阵 D 。

2.6.2 通过 Cholesky 分解得到 SDE 扩散系数

为此我们提供其中一种方案, 根据 Cholesky 分解来求解 SDE 扩散系数 D_{ik} 。根据 Cholesky 分解, 我们可以由 Fokker-Planck 方程对应的扩散系数 Q_{ik} 得到

SDE 对应的扩散系数 D_{ik} 。对于 3 阶 Hermitian 正定矩阵 Q_{ik} ，其表达式为

$$Q = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{21} & Q_{31} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{32} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} \end{bmatrix}, \quad (2.155)$$

经过 Cholesky 分解之后，得到下三角矩阵 D_{ik} 。并且满足

$$D_{11} = \sqrt{Q_{11}}, \quad (2.156)$$

$$D_{21} = \frac{Q_{21}}{D_{11}}, \quad (2.157)$$

$$D_{31} = \frac{Q_{31}}{D_{11}}, \quad (2.158)$$

$$D_{22} = \sqrt{Q_{22} - D_{21}^2}, \quad (2.159)$$

$$D_{32} = \frac{Q_{32} - D_{21}D_{31}}{D_{22}}, \quad (2.160)$$

$$D_{33} = \sqrt{Q_{33} - D_{31}^2 - D_{32}^2}, \quad (2.161)$$

即有

$$D = \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & 0 \\ D_{21} & D_{22} & 0 \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{bmatrix}, \quad (2.162)$$

根据表达式 (2.141) 得到

$$G_i = F_i - \frac{1}{2} D_{jk} \frac{\partial D_{ik}}{\partial v_{aj}}, \quad (2.163)$$

因为积分是对 FP 方程中的扩散系数 Q 求解的，因此，可以将 G_i 中含有微分的部分表示为对 Q 的微分，则有

$$\begin{aligned} G_1 &= F_1 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{12} \frac{\partial D_{12}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{13} \frac{\partial D_{13}}{\partial v_{a1}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{22} \frac{\partial D_{12}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{23} \frac{\partial D_{13}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{32} \frac{\partial D_{12}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{33} \frac{\partial D_{13}}{\partial v_{a3}} \\ &= F_1 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a3}}, \end{aligned} \quad (2.164)$$

$$\frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}} = \frac{\partial \sqrt{Q_{11}}}{\partial v_{a1}} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{Q_{11}}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}} = \frac{1}{2D_{11}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}}, \quad (2.165)$$

$$\frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a2}} = \frac{1}{2D_{11}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}}, \quad (2.166)$$

$$\frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a3}} = \frac{1}{2D_{11}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}}, \quad (2.167)$$

$$G_1 = F_1 - \frac{1}{4} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{4} \frac{D_{21}}{D_{11}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{4} \frac{D_{31}}{D_{11}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}}, \quad (2.168)$$

$$\begin{aligned} G_2 &= F_2 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{12} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{13} \frac{\partial D_{23}}{\partial v_{a1}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{22} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{23} \frac{\partial D_{23}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{32} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{33} \frac{\partial D_{23}}{\partial v_{a3}} \\ &= F_2 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{22} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{32} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a3}}, \end{aligned} \quad (2.169)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a1}} &= \frac{\partial}{\partial v_{a1}} \frac{Q_{21}}{D_{11}} \\ &= \frac{1}{D_{11}^2} \left[\frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a1}} D_{11} - Q_{21} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}} \right] \\ &= \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{Q_{21}}{D_{11}^2} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}}, \end{aligned} \quad (2.170)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a1}} &= \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{Q_{21}}{D_{11}^2} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}} \\ &= \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{D_{21}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}}, \end{aligned} \quad (2.171)$$

$$\frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a2}} = \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{21}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}}, \quad (2.172)$$

$$\frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a3}} = \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{21}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}}, \quad (2.173)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a2}} &= \frac{\partial}{\partial v_{a2}} (\sqrt{Q_{22} - D_{21}^2}) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{Q_{22} - D_{21}^2}} \left[\frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a2}} - 2D_{21} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a2}} \right] \\ &= \frac{1}{2D_{22}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{21}}{D_{11}D_{22}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a2}} + \frac{D_{21}^2}{2D_{11}^2 D_{22}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}}, \end{aligned} \quad (2.174)$$

$$\frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a3}} = \frac{1}{2D_{22}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{21}}{D_{11}D_{22}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} + \frac{D_{21}^2}{2D_{11}^2 D_{22}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}}, \quad (2.175)$$

$$\begin{aligned} G_2 &= F_2 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{22} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{32} \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a3}} \\ &= F_2 - \frac{1}{2} D_{11} \left[\frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{D_{21}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{21} \left[\frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{21}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}} \right] - \frac{1}{2} D_{22} \left[\frac{1}{2D_{22}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{21}}{D_{11}D_{22}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a2}} + \frac{D_{21}^2}{2D_{11}^2 D_{22}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{31} \left[\frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{21}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} \right] - \frac{1}{2} D_{32} \left[\frac{1}{2D_{22}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{21}}{D_{11}D_{22}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} + \frac{D_{21}^2}{2D_{11}^2 D_{22}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} \right] \\ &= F_2 + \frac{1}{4} \frac{D_{21}}{D_{11}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{4} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad + \frac{1}{4} \frac{D_{21}(D_{22}D_{31} - D_{21}D_{32})}{D_{11}^2 D_{22}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} \frac{D_{22}D_{31} - D_{21}D_{32}}{D_{11}D_{22}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{4} \frac{D_{32}}{D_{22}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a3}}, \end{aligned} \quad (2.176)$$

$$\begin{aligned} G_3 &= F_3 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{12} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{13} \frac{\partial D_{33}}{\partial v_{a1}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{22} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{23} \frac{\partial D_{33}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{32} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{33} \frac{\partial D_{33}}{\partial v_{a3}} \\ &= F_3 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{22} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{32} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{33} \frac{\partial D_{33}}{\partial v_{a3}}, \end{aligned} \quad (2.177)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a1}} &= \frac{\partial}{\partial v_{a1}} \frac{Q_{31}}{D_{11}} \\ &= \frac{1}{D_{11}^2} \left(\frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a1}} D_{11} - Q_{31} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}} \right) \\ &= \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a1}} - \frac{Q_{31}}{D_{11}^2} \frac{\partial D_{11}}{\partial v_{a1}} \\ &= \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a1}} - \frac{D_{31}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}}, \end{aligned} \quad (2.178)$$

$$\frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a2}} = \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{31}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}}, \quad (2.179)$$

$$\frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a3}} = \frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{31}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}}, \quad (2.180)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a2}} &= \frac{\partial}{\partial v_{a2}} \frac{Q_{32} - D_{21} D_{31}}{D_{22}} \\ &= \frac{1}{D_{22}^2} \left[\left(\frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a2}} - D_{21} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a2}} - D_{31} \frac{\partial D_{21}}{\partial v_{a2}} \right) D_{22} \right. \\ &\quad \left. - (Q_{32} - D_{21} D_{31}) \frac{\partial D_{22}}{\partial v_{a2}} \right] \\ &= \frac{D_{21}}{2D_{11}^2 D_{22}^2} (2D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}) \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}}{D_{11} D_{22}^2} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a2}} \\ &\quad - \frac{D_{32}}{2D_{22}^2} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{21}}{D_{11} D_{22}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a2}} + \frac{1}{D_{22}} \frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a2}}, \end{aligned} \quad (2.181)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a3}} &= \frac{\partial}{\partial v_{a3}} \frac{Q_{32} - D_{21} D_{31}}{D_{22}} \\ &= \frac{D_{21}}{2D_{11}^2 D_{22}^2} (2D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}) \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}}{D_{11} D_{22}^2} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} \\ &\quad - \frac{D_{32}}{2D_{22}^2} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{21}}{D_{11} D_{22}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a3}} + \frac{1}{D_{22}} \frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a3}}, \end{aligned} \quad (2.182)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{33}}{\partial v_{a3}} &= \frac{\partial}{\partial v_{a3}} \sqrt{Q_{33} - D_{31}^2 - D_{32}^2} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{D_{33}} \left[\frac{\partial Q_{33}}{\partial v_{a3}} - 2D_{31} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a3}} - 2D_{32} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a3}} \right] \\ &= \frac{(D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32})^2}{2D_{11}^2 D_{22}^2 D_{33}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} + \frac{D_{32} (D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32})}{D_{11} D_{22}^2 D_{33}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} + \frac{D_{32}^2}{2D_{22}^2 D_{33}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a3}} \\ &\quad - \frac{D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}}{D_{11} D_{22} D_{33}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{32}}{D_{22} D_{33}} \frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a3}} + \frac{1}{2D_{33}} \frac{\partial Q_{33}}{\partial v_{a3}}, \end{aligned} \quad (2.183)$$

$$\begin{aligned}
 G_3 = & F_3 - \frac{1}{2} D_{11} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} D_{21} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} D_{22} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a2}} \\
 & - \frac{1}{2} D_{31} \frac{\partial D_{31}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{32} \frac{\partial D_{32}}{\partial v_{a3}} - \frac{1}{2} D_{33} \frac{\partial D_{33}}{\partial v_{a3}} \\
 = & F_3 - \frac{1}{2} D_{11} \left(\frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a1}} - \frac{D_{31}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}} \right) \\
 & - \frac{1}{2} D_{21} \left(\frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{31}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}} \right) \\
 & - \frac{1}{2} D_{22} \left[\frac{D_{21}}{2D_{11}^2 D_{22}^2} (2D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}) \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}}{D_{11} D_{22}^2} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a2}} \right. \\
 & \left. - \frac{D_{32}}{2D_{22}^2} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a2}} - \frac{D_{21}}{D_{11} D_{22}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a2}} + \frac{1}{D_{22}} \frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a2}} \right] \\
 & - \frac{1}{2} D_{31} \left(\frac{1}{D_{11}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{31}}{2D_{11}^2} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} \right) \\
 & - \frac{1}{2} D_{32} \left[\frac{D_{21}}{2D_{11}^2 D_{22}^2} (2D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}) \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}}{D_{11} D_{22}^2} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} \right. \\
 & \left. - \frac{D_{32}}{2D_{22}^2} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{21}}{D_{11} D_{22}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a3}} + \frac{1}{D_{22}} \frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a3}} \right] \\
 & - \frac{1}{2} D_{33} \left[\frac{(D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32})^2}{2D_{11}^2 D_{22}^2 D_{33}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a3}} + \frac{D_{32}(D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32})}{D_{11} D_{22}^2 D_{33}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a3}} + \frac{D_{32}^2}{2D_{22}^2 D_{33}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a3}} \right. \\
 & \left. - \frac{D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}}{D_{11} D_{22} D_{33}} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a3}} - \frac{D_{32}}{D_{22} D_{33}} \frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a3}} + \frac{1}{2D_{33}} \frac{\partial Q_{33}}{\partial v_{a3}} \right], \tag{2.184}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G_3 = & F_3 + \frac{1}{4} \frac{D_{31}}{D_{11}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a1}} - \frac{1}{2} \frac{\partial Q_{31}}{\partial v_{a1}} \\
 & + \frac{1}{4} \frac{D_{21}(D_{21} D_{32} - D_{22} D_{31})}{D_{11}^2 D_{22}} \frac{\partial Q_{11}}{\partial v_{a2}} + \frac{1}{2} \frac{D_{22} D_{31} - D_{21} D_{32}}{D_{11} D_{22}} \frac{\partial Q_{21}}{\partial v_{a2}} \\
 & + \frac{1}{4} \frac{D_{32}}{D_{22}} \frac{\partial Q_{22}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{2} \frac{\partial Q_{32}}{\partial v_{a2}} - \frac{1}{4} \frac{\partial Q_{33}}{\partial v_{a3}}, \tag{2.185}
 \end{aligned}$$

接下来来求解 Q 对速度的微分

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial Q_{ik}}{\partial v_{aj}} = & \frac{\partial}{\partial v_{aj}} \left(\Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v} \delta_{ik} - \Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{v} \frac{v_i v_k}{v^2} \right) \\
 = & \Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{v_j}{v^3} \delta_{ik} - \Gamma_a \sum_b \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \left[-\frac{3v_j}{v^5} v_i v_k + \frac{1}{v^3} \delta_{ij} v_k + \frac{1}{v^3} \delta_{jk} v_i \right] \tag{2.186}
 \end{aligned}$$

将 G_i 的表达式代入 (2.140)，我们就可以采用 SDE 来求解背景粒子为任意分布函数情况下入射粒子的在含库仑碰撞时的动力学行为。考虑到 PIC 模拟中宏粒子的设置，相比于真实粒子的模拟，每个格子中的粒子束将减少，所得 $\partial Q_{ik}/\partial v_{aj}$ 的值相比于真实情况要更大一些。因此，对于 PIC 模拟的情况需要有一个修正。

假设每个宏粒子的数量代表了 N_m 个真实粒子。使用 Klimontovich 表示来离散分布函数有

$$f_b(\mathbf{x}_b, \mathbf{v}_b, t) = \sum_{n=1}^N S(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_{bn}) \delta(\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_{bn}), \quad (2.187)$$

其中 N 为总宏粒子数目, S 表示形状函数^[73]。我们得到宏粒子对应 P_i , Q_{ik} 和 $\partial Q_{ik}/\partial v_{aj}$ 的值

$$P_i = -\Gamma_{ma} \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_a} \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{v_i}{v^3}, \quad (2.188)$$

$$Q_{ik} = \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{1}{v} \delta_{ik} - \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{1}{v} \frac{v_i v_k}{v^2}. \quad (2.189)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial v_{aj}} &= \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{v_j}{v^3} \delta_i k \\ &\quad - \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \left[-\frac{3v_j}{v^5} v_i v_k + \frac{1}{v^3} \delta_{ij} v_k + \frac{1}{v^3} \delta_{jk} v_i \right]. \end{aligned} \quad (2.190)$$

其中 $\Gamma_{ma} = N_m^2 \Gamma_a$ 是宏粒子的碰撞参数。在这种情况下, 真实粒子分布函数为

$$f_b(\mathbf{x}_b, \mathbf{v}_b, t) = \sum_{n=1}^N S(\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_{bn}) \delta(\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_{bn}) N_m, \quad (2.191)$$

因此我们可以得到在 PIC 模拟过程中真实粒子对应的 P_{ri} , $\partial Q_{rik}/\partial v_{aj}$

$$P_i = -N_m \Gamma_m \sum_b \frac{m_a + m_b}{m_a} \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{v_i}{v^3}, \quad (2.192)$$

$$Q_{ik} = N_m \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{1}{v} \delta_{ik} - N_m \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{1}{v} \frac{v_i v_k}{v^2}. \quad (2.193)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial v_{aj}} &= N_m \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \frac{v_j}{v^3} \delta_i k \\ &\quad - N_m \Gamma_{ma} \sum_b \sum_n S(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{bn}) \left[-\frac{3v_j}{v^5} v_i v_k + \frac{1}{v^3} \delta_{ij} v_k + \frac{1}{v^3} \delta_{jk} v_i \right]. \end{aligned} \quad (2.194)$$

因此, 由此我们可以看出真实粒子和宏粒子情况下系数的关系为

$$\mathbf{F}_r = \frac{1}{N_m} \mathbf{F}, \quad (2.195)$$

$$\mathbf{G}_r = \frac{1}{N_m} \mathbf{G}. \quad (2.196)$$

将方程 (2.188)-(2.190) 带入方程 (2.46), (2.168), (2.176) 和 (2.185), 可以得到宏粒子情况下的 $\mathbf{F}$ 和 $\mathbf{G}$ 。再根据方程 (2.195) 和 (2.196), 得到 PIC 模拟中背景为任意分布时 Stratonovich SDE 的表达式。

2.6.3 将碰撞加入到 PIC 中的讨论

在上一小节中，我们已经介绍了一种将隐式 Monte-Carlo 碰撞部分 (MCC) 加入 PIC 模拟的方法。但是经过我们的测试，我们发现由于宏粒子较少，相比于真实粒子模拟的噪声，PIC 模拟过程中电磁场的噪声更大一些。并且碰撞频率相比于真实情况也更大一些。为了展示这个问题，我们采用如下测试例子。格子大小设为 $\Delta x = 6 \times 10^{-4} \text{m}$ ，等离子体密度设为 $1 \times 10^{20} \text{m}^{-3}$ 的均匀分布，初始速度为 $5 \times 10^6 \text{e}_x \text{m/s}$ ，模拟区域设为 $128\Delta x \times 128\Delta x \times 128\Delta x$ 的 3D 空间，背景等离子体和束粒子温度分别为 $T_0 = 32 \text{eV}$ 和 $T_b = 0$ 。对于保结构的几何 PIC 算法 SymPIC，我们用每格 100 个宏粒子来表示背景等离子体并且每个格子中放 1 个宏粒子表示束粒子。我们分别采用 ISSDE 和不含 MCC 的 SymPIC 来计算电子束垂直方向能量的增加如图 2.3 所示。可以清楚的看到在这种参数下 PIC 的数值碰撞频率比 ISSDE 的碰撞频率高。因此在这种情况下在 PIC 加上额外的 MCC 是没有意义的，并且相比于 ISSDE 采用 PIC 并不能获得与碰撞相关的更精确的效应。为了将数值噪声减少到可以接受的水平，需要增加更多的宏粒子，这将大大增加计算量。并且，即使是数值噪声水平与真实碰撞相当或者小于真实碰撞，我们依旧需要对真实碰撞和数值噪声进行区分。我们将在今后的工作中报导相关的研究。

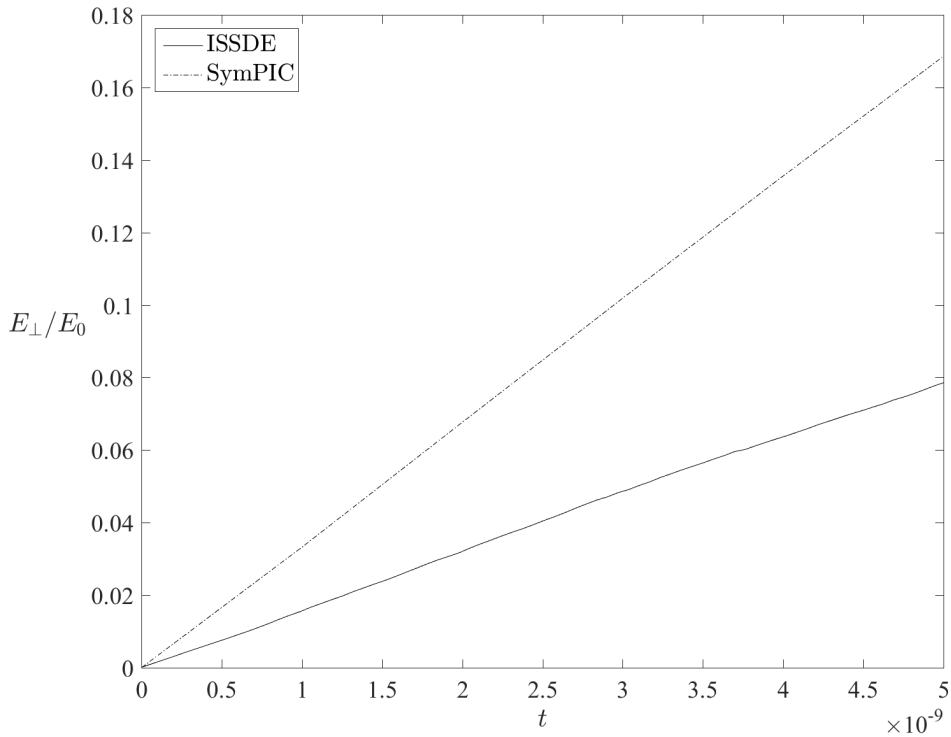


图 2.3 SymPIC 和 ISSDE 计算电子束垂直方向能量增加的比较

第 3 章 ISSDE 算法格式与程序设计

得到不同背景等离子体分布对应的 Stratonovich SDE 后, 即可以由 Stratonovich 积分定义和 Euler-Maruyama 数值方法的要求对 Stratonovich SDE 离散求解, 由此得到隐式中点格式, 然后根据分裂法将离散的 Stratonovich SDE 分为确定性部分和碰撞部分, 对碰撞部分采用 Newton-Raphson 方法和拟牛顿法进行求解, 便可以构造出包含等离子体库仑碰撞的 Monte-Carlo 隐式碰撞模拟程序 ISSDE。本节首先介绍 ISSDE 核心算法, 然后给出 ISSDE 程序的构成, 相关扩展以及程序实现的程序框图。作为与分裂法下隐式中点格式算法的对比, 我们介绍了随机 Runge-Kutta 方法下的碰撞算法。为了简化问题, 我们采用简化的 Lorentzian 等离子体所对应的 Stratonovich SDE 来进行离散。对于 Lorentzian 等离子体, 即电子与相对冷的离子的碰撞占主要成分时, 可以忽略电子和电子的碰撞, 因此这里的折合质量为电子和离子的折合质量。又因为

$$m_r = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} = \frac{m_e m_i}{m_e + m_i}, \quad m_e \ll m_i, \quad (3.1)$$

因此

$$m_r \approx m_e, \quad \frac{m_e}{m_r} \approx 1. \quad (3.2)$$

我们可以对 Lorentzian 等离子体做进一步简化, 则方程 (2.66) 有

$$d\mathbf{v} = -\Omega(\mathbf{v})\mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}), \quad (3.3)$$

扩展到有外场力的情况有

$$d\mathbf{v} = \frac{\mathbf{F}_L dt}{m_a} - \Omega(\mathbf{v}) \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}), \quad (3.4)$$

其中 $\mathbf{F}_L$ 为洛伦兹力, $\Omega(\mathbf{v}) = \sqrt{\frac{\beta}{|\mathbf{v}|^5}}$ 。

3.1 Stratonovich SDE 的离散求解

对 Stratonovich SDE 进行离散求解, 对于非磁化情况下所得的数值求解的方程为

$$\begin{cases} d\mathbf{v} &= -\Omega(v)\mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}), \\ d\mathbf{x} &= \mathbf{v}dt, \end{cases} \quad (3.5)$$

根据 Stratonovich 积分的定义和 Euler-Maruyama 方法的要求进行离散得隐式中点表达式

$$\begin{cases} \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n - \Omega \left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \right) \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times \left[\frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times (\mathbf{W}^{n+1} - \mathbf{W}^n) \right], \\ \mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} dt, \end{cases} \quad (3.6)$$

其中上标表示时间步。对隐式中点格式，每个矢量的几何关系如图3.1。由方程

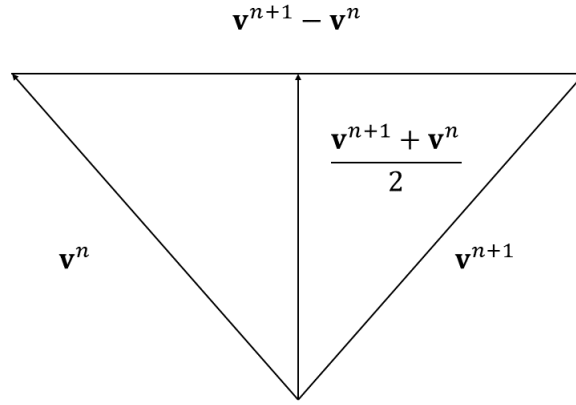


图 3.1 对 Lorentzian 等离子体，采用中点格式时各个矢量的几何关系

(3.6) 的叉乘关系可以看出

$$\left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{2} \right)^2 + \left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \right)^2 = (\mathbf{v}^n)^2 = (\mathbf{v}^{n+1})^2. \quad (3.7)$$

因此，对简化的 Lorentzian 等离子体情况下，中点格式是能量守恒的。因为这个方程 (3.6) 为隐格式，采用 Newton-Raphson 方法和拟牛顿法迭代求解^[74-79]。对于 Newton-Raphson 方法，因为离散方程中 $\mathbf{v}$ 的求解是与 $\mathbf{x}$ 无关的，可以先单独计算 $\mathbf{v}$ 的值，再带入计算 $\mathbf{x}$ 。令目标函数为

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}^{n+1}) = -\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n - \Omega \left(\frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \right) \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times \frac{\mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{v}^n}{2} \times (\mathbf{W}^{n+1} - \mathbf{W}^n), \quad (3.8)$$

其分量形式为

$$\begin{aligned} g_1(v_x^{n+1}, v_y^{n+1}, v_z^{n+1}) = & -v_x^{n+1} + v_x^n \\ & - \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} \left[\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \right. \\ & \left. - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} \left(\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) \right) \right], \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned}
 g_2(v_x^{n+1}, v_y^{n+1}, v_z^{n+1}) = & -v_y^{n+1} + v_y^n \\
 & - \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} \left[\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \right. \\
 & \left. - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \right], \quad (3.10)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 g_3(v_x^{n+1}, v_y^{n+1}, v_z^{n+1}) = & -v_z^{n+1} + v_z^n \\
 & - \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} \left[\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) \right) \right. \\
 & \left. - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \right], \quad (3.11)
 \end{aligned}$$

得目标函数 $\mathbf{g}(\mathbf{v}^{n+1})$ 对各个分量的 Jacobian 矩阵

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial v_x^{n+1}} & \frac{\partial g_1}{\partial v_y^{n+1}} & \frac{\partial g_1}{\partial v_z^{n+1}} \\ \frac{\partial g_2}{\partial v_x^{n+1}} & \frac{\partial g_2}{\partial v_y^{n+1}} & \frac{\partial g_2}{\partial v_z^{n+1}} \\ \frac{\partial g_3}{\partial v_x^{n+1}} & \frac{\partial g_3}{\partial v_y^{n+1}} & \frac{\partial g_3}{\partial v_z^{n+1}} \end{bmatrix}, \quad (3.12)$$

经过计算得

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_1}{\partial v_x^{n+1}} = & -1 + \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_x^{n+1} + v_x^n) \right] \left[\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \right. \\
 & \left. - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) \right) \right] \\
 & - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_y^{n+1} + v_y^n)(W_y^{n+1} - W_y^n) + (v_z^{n+1} + v_z^n)(W_z^{n+1} - W_z^n)], \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_1}{\partial v_y^{n+1}} = & \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_y^{n+1} + v_y^n) \right] \left[\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \right. \\
 & \left. - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) \right) \right] \\
 & - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_x^{n+1} + v_x^n)(W_y^{n+1} - W_y^n) + (v_z^{n+1} + v_z^n)(W_z^{n+1} - W_z^n)], \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_1}{\partial v_z^{n+1}} = & \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_z^{n+1} + v_z^n) \right] \left[\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \right. \\
 & \left. - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} \left(\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) \right) \right] \\
 & - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_z^{n+1} + v_z^n)(W_x^{n+1} - W_x^n) + (v_x^{n+1} + v_x^n)(W_z^{n+1} - W_z^n)], \quad (3.15)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_2}{\partial v_x^{n+1}} = & \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_x^{n+1} + v_x^n) \right] \left[\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \right. \\
 & - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \\
 & \left. - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_x^{n+1} + v_x^n)(W_y^{n+1} - W_y^n) + (v_y^{n+1} + v_y^n)(W_x^{n+1} - W_x^n)] \right], \quad (3.16)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_2}{\partial v_y^{n+1}} = & -1 + \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_y^{n+1} + v_y^n) \right] \left[\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \right. \\
 & - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \\
 & \left. - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_x^{n+1} + v_x^n)(W_y^{n+1} - W_y^n) + (v_y^{n+1} + v_y^n)(W_x^{n+1} - W_x^n)] \right], \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_2}{\partial v_z^{n+1}} = & \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_z^{n+1} + v_z^n) \right] \left[\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \right. \\
 & - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \\
 & \left. - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_y^{n+1} + v_y^n)(W_z^{n+1} - W_z^n) + (v_z^{n+1} + v_z^n)(W_y^{n+1} - W_y^n)] \right], \quad (3.18)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_3}{\partial v_x^{n+1}} = & \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_x^{n+1} + v_x^n) \right] \left[\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \right. \\
 & - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) \right) \\
 & \left. - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_y^{n+1} + v_y^n)(W_z^{n+1} - W_z^n) + (v_z^{n+1} + v_z^n)(W_y^{n+1} - W_y^n)] \right], \quad (3.19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_3}{\partial v_y^{n+1}} = & \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_y^{n+1} + v_y^n) \right] \left[\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) \right) \right. \\
 & - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \\
 & \left. - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_z^{n+1} + v_z^n)(W_y^{n+1} - W_y^n) + 2(v_y^{n+1} + v_y^n)(W_z^{n+1} - W_z^n)] \right], \quad (3.20)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_3}{\partial v_z^{n+1}} = & -1 + \left[\frac{5}{8} \sqrt{\beta} v^{-\frac{9}{2}} (v_z^{n+1} + v_z^n) \right] \left[\frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} \left(\frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_x^{n+1} - W_x^n) - \frac{v_x^{n+1} + v_x^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) \right) \right. \\
 & - \frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} \left(\frac{v_y^{n+1} + v_y^n}{2} (W_z^{n+1} - W_z^n) - \frac{v_z^{n+1} + v_z^n}{2} (W_y^{n+1} - W_y^n) \right) \\
 & \left. - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\beta}{v^5}} [(v_x^{n+1} + v_x^n)(W_z^{n+1} - W_z^n) + 2(v_y^{n+1} + v_y^n)(W_x^{n+1} - W_x^n)] \right], \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

令 $J^- = J^{-1}$, 给定初值 $v^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$, 根据迭代式^[74-76]

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n - J^- \mathbf{g}(\mathbf{v}^n), \quad (3.22)$$

来得到 $(v_x^{n+1}, v_y^{n+1}, v_z^{n+1})$, 反复迭代, 直到 v^{n+1} 与 v^n 的误差小于给定精度。由此得到每时间步 Stratonovich SDE 的数值解。

3.2 采用分裂法处理外场

当存在复杂外场时, 采用传统算法来计算 Stratonovich SDE 可能会因为数值误差积累而使算法不具有长期的稳定性。为了改善数值算法的稳定性, 采用分裂法的思想, 将系统分为多个子系统, 再采用数值算法分别求解每个子系统^[9,80-81]。ISSDE 主要求解的方程为

$$\begin{cases} d\mathbf{x} = \mathbf{v}dt, \\ d\mathbf{v} = \frac{q}{m}\mathbf{E}dt + \frac{q}{m}\mathbf{v} \times \mathbf{B}dt + \mathbf{a}_c dt. \end{cases} \quad (3.23)$$

其中 $\mathbf{a}_c$ 为由碰撞引起的加速度, 对于 Lorentzian 等离子体

$$\mathbf{a}_{cL}dt = -\frac{m_a}{m_b}\Gamma_a n_b \frac{\mathbf{v}}{v^3}dt - \Omega(\mathbf{v})\mathbf{v} \times [\mathbf{v} \times d\mathbf{W}], \quad (3.24)$$

对 Maxwellian 等离子体

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{cM}dt = & \left[-\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ & + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \tilde{\mathbf{v}}_a dt \\ & \left. + \mathcal{N}^{1/2} d\mathbf{W} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times d\mathbf{W})}{\tilde{v}_a^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

同样可以写成

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}, \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{q}{m}\mathbf{E} + \frac{q}{m}\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \mathbf{a}_c. \end{cases} \quad (3.26)$$

根据分裂法的思想, 可以将方程看成一个矢量场 $\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v})$, 则有

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{q}{m}\mathbf{E} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{q}{m}\mathbf{v} \times \mathbf{B} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{a}_c \end{bmatrix}, \quad (3.27)$$

因此, 可以将上述系统分为 4 个子系统, 然后分别求解, 这些子系统分别为

$$\phi_t^{F_1} : \begin{cases} \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + t\mathbf{v}_0, \\ \mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0, \end{cases} \quad (3.28)$$

$$\phi_t^{F_2} : \begin{cases} \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0, \\ \mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + tq\mathbf{E}(\mathbf{x}_0)/m, \end{cases} \quad (3.29)$$

$$\phi_t^{F_3} : \begin{cases} \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + t\mathbf{v}_0, \\ \mathbf{v}(t) = \exp(-t\frac{q}{m}\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{x}_0))\mathbf{v}_0, \end{cases} \quad (3.30)$$

其中

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 0 & -B_3(\mathbf{x}) & B_2(\mathbf{x}) \\ B_3(\mathbf{x}) & 0 & -B_1(\mathbf{x}) \\ -B_2(\mathbf{x}) & B_1(\mathbf{x}) & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.31)$$

$$\phi_t^{F_4} : \begin{cases} \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0, \\ \int d\mathbf{v} = \int \mathbf{a}_c dt. \end{cases} \quad (3.32)$$

这样做的主要目的是，对于确定性的部分，我们可以采用保体积的算法来计算，而随机的部分，也就是 $\phi_t^{F_4}$ ，依旧采用 Newton-Raphson 方法和拟牛顿方法进行计算。当随机扰动可以忽略时，整个随机算法是保结构的。为了类似于 Boris 算法，构造隐式中点格式的二阶算法，我们可以采用这样的组合

$$G_h^2 = \phi_{h/2}^{F_1} \circ \phi_{h/2}^{F_2} \circ \phi_{h/2}^{F_4} \circ \phi_h^{F_3} \circ \phi_{h/2}^{F_4} \circ \phi_{h/2}^{F_2} \circ \phi_{h/2}^{F_1}, \quad (3.33)$$

然后对各个部分分别计算。当没有碰撞部分影响时，退化到

$$G_h^2 = \phi_{h/2}^{F_1} \circ \phi_{h/2}^{F_2} \circ \phi_h^{F_3} \circ \phi_{h/2}^{F_2} \circ \phi_{h/2}^{F_1}, \quad (3.34)$$

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+\frac{1}{2}} = \mathbf{x}_k + \frac{h}{2}\mathbf{v}_k, \\ \mathbf{v}^- = \mathbf{v}_k + \frac{hq}{2m}\mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- + \frac{hq}{2m}\mathbf{B}_{k+\frac{1}{2}} \times (\mathbf{v}^- + \mathbf{v}^+), \\ \mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}^+ + \frac{hq}{2m}\mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{k+1}. \end{cases} \quad (3.35)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \frac{h}{2}(\mathbf{v}_k + \mathbf{v}_{k+1}), \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{v}_{k+1} &= (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})^{-1} (\mathbf{I} + \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}}) (\mathbf{v}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{hq}{2m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{hq}{2m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}} \\
 &= (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})^{-1} (\mathbf{I} + \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}}) \mathbf{v}_k \\
 &\quad + (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})^{-1} (\mathbf{I} + \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}}) \frac{hq}{2m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{hq}{2m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}} \\
 &= (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})^{-1} (\mathbf{I} + \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}}) \mathbf{b}_k \\
 &\quad + (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})^{-1} [(\mathbf{I} + \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}}) + (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})] \frac{hq}{2m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}} \\
 &= (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})^{-1} (\mathbf{I} + \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}}) \mathbf{v}_k + (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}})^{-1} \frac{hq}{m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}}. \quad (3.37)
 \end{aligned}$$

其中

$$\hat{\mathbf{B}}_{k+\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 0 & -B_{k+\frac{1}{2}}^3 & B_{k+\frac{1}{2}}^2 \\ B_{k+\frac{1}{2}}^3 & 0 & -B_{k+\frac{1}{2}}^1 \\ -B_{k+\frac{1}{2}}^2 & B_{k+\frac{1}{2}}^1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.38)$$

使用蛙跳法, 令 $\mathbf{x}_k \approx \mathbf{x}(kh)$ 以及 $\mathbf{v}_k \approx \mathbf{v}(kh - \frac{h}{2})$, 因此有

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + h\mathbf{v}_{k+1}, \\ \mathbf{v}_{k+1} = (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_k)^{-1} (\mathbf{I} + \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_k) \mathbf{v}_k + (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m} \hat{\mathbf{B}}_k)^{-1} \frac{hq}{m} \mathbf{E}_k, \end{cases} \quad (3.39)$$

即为 Boris 算法。采用 Boris 算法计算带电粒子在 Tokamak 场中运动如图3.2, 其在极向面的投影为图3.3。

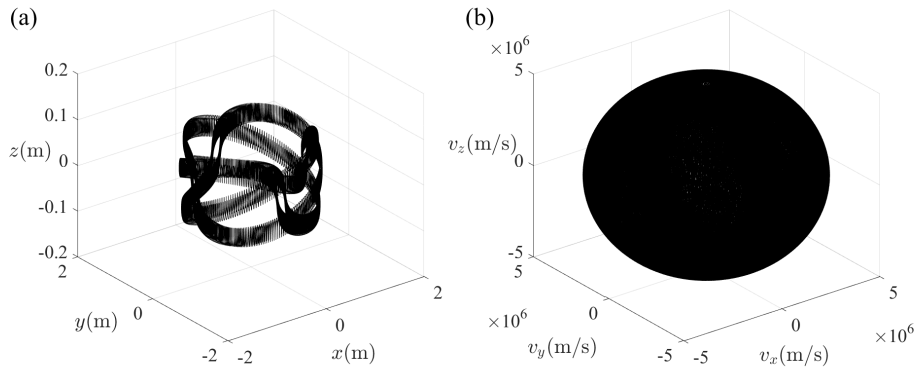


图 3.2 采用 Boris 算法计算带电粒子在 Tokamak 场中的运动

对于具有碰撞项的方程, 采用分裂法进行处理, 如果确定性部分采用保结构算法, 而碰撞部分采用传统算法, 系统的耗散主要来源于碰撞部分和由于分裂法而产生的误差。在同一个时间步中, 确定性部分是保持算法结构的, 而随机部分改变了算法的结构, 但下一步时, 确定性部分保持算法结构即保持了现在确定性部分以及上一步碰撞部分对算法结构的改变, 而碰撞部分进一步改变算法的结

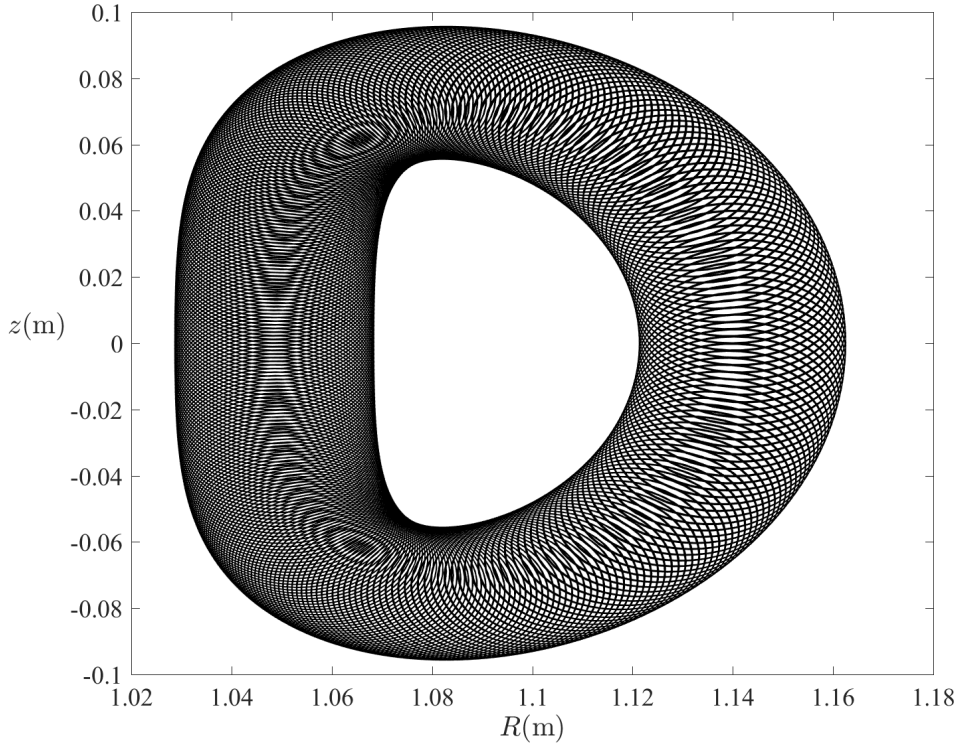


图 3.3 采用 Boris 算法计算带电粒子在 Tokamak 场中的运动在极向面的投影

构。最终的结果为确定性部分一直是由保结构算法保持算法结构的，而耗散部分，对算法保结构的改变都体现在碰撞部分。

对于含碰撞部分的系统，构造的分裂法为

$$G_h^2 = \phi_{h/2}^{F_1} \circ \phi_{h/2}^{F_2} \circ \phi_{h/2}^{F_4} \circ \phi_h^{F_3} \circ \phi_{h/2}^{F_4} \circ \phi_{h/2}^{F_2} \circ \phi_{h/2}^{F_1}, \quad (3.40)$$

写为分量的形式有

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+\frac{1}{2}} &= \mathbf{x}_k + \frac{h}{2} \mathbf{v}_k, \\ \mathbf{v}^- &= \mathbf{v}_k + \frac{hq}{2m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{v}^* &= \mathbf{v}^- + \int_{kh}^{(k+\frac{1}{2})h} \mathbf{a}_c(\mathbf{v}^-) dt, \\ \mathbf{v}^+ &= \mathbf{v}^* + \frac{hq}{2m} \mathbf{B}_{k+\frac{1}{2}} \times (\mathbf{v}^* + \mathbf{v}^+), \\ \mathbf{v}^\# &= \mathbf{v}^+ + \int_{(k+\frac{1}{2})h}^{(k+1)h} \mathbf{a}_c(\mathbf{v}^+) dt, \\ \mathbf{v}_{k+1} &= \mathbf{v}^\# + \frac{hq}{2m} \mathbf{E}_{k+\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_{k+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2} \mathbf{v}_{k+1}. \end{cases} \quad (3.41)$$

同样的使用蛙跳法, 令 $\mathbf{x}_k \approx \mathbf{x}(kh)$ 以及 $\mathbf{v}_k \approx \mathbf{v}(kh - \frac{h}{2})$, 则有

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{k+1} &= \mathbf{x}_k + h\mathbf{v}_{k+1}, \\ \mathbf{v}^- &= \mathbf{v}_k + \frac{hq}{2m}\mathbf{E}_k, \\ \mathbf{v}^* &= \mathbf{v}^- + \int_{kh}^{(k+\frac{1}{2})h} \mathbf{a}_c(\mathbf{v}^-)dt, \\ \mathbf{v}^+ &= (\mathbf{I} - \frac{hq}{2m}\hat{\mathbf{B}}_k)^{-1}(\mathbf{I} + \frac{hq}{2m}\hat{\mathbf{B}}_k)\mathbf{v}^*, \\ \mathbf{v}^\# &= \mathbf{v}^+ + \int_{(k+\frac{1}{2})h}^{(k+1)h} \mathbf{a}_c(\mathbf{v}^+)dt, \\ \mathbf{v}_{k+1} &= \mathbf{v}^\# + \frac{hq}{2m}\mathbf{E}_k, \end{cases} \quad (3.42)$$

3.3 牛顿迭代与拟牛顿法

当碰撞项较为简单时, 离散方程也较为简单, 采用牛顿方法进行求解时迭代的 Jacobian 矩阵也较为简单。对于 Lorentzian 等离子体情况就是如此。而对于背景等离子分布为 Maxwellian 分布时, 离散方程就变得复杂起来, 目标函数的 Jacobian 矩阵就会出现稀疏性, 奇异性或者病态等问题, 此时迭代的稳定性很差。为了克服这个问题, 使对于更一般情况下 ISSDE 也能够更好的计算, 我们引入 4 种可以替换的拟牛顿方法来替换牛顿方法。

3.3.1 非线性方程组解法——牛顿法

牛顿法又称为 Newton-Raphson 法, 是用于求解非线性问题的典型方法, 它是一个通过生成一系列不断靠近我们想要的解的点的迭代过程。在教学上可以说通过将 $f(x)$ 写为在当前时刻近似估计 x_c 处的泰勒展开来获得的方法。牛顿法也可以简单而自然的有牛顿定理得出^[82]

$$f(x) = f(x_c) + \int_{x_c}^x f'(z)dz. \quad (3.43)$$

将不定积分作如下定义是合理的

$$\int_{x_c}^x f'(z)dz \approx f'(x_c)(x - x_c). \quad (3.44)$$

当只有一个变量时称为切线法, 而存在多个变量则需要采用目标函数的 Jacobi 矩阵对非线性方程组的解进行迭代。相比于切线法, 对于单变量, 拟牛顿法采用割线法, 对于多变量用近似矩阵趋近 Jacobi 矩阵, 然后对非线性方程组进行迭代求解。牛顿法为平方收敛, 自矫正误差不会传递。但是求导过程较为复杂, 并

且赋值后的 Jacobi 矩阵可能会稀疏性，奇异性或者病态等问题，导致数值不稳定性。拟牛顿法的收敛速度介于直线收敛之间，速度会慢于牛顿法，但是稳定性很高。割线法有很多种，2 点割线法， n 点割线法， $n+1$ 点割线法（ n 是方程的个数），其中 $n+1$ 点割线法的效率是最高的。拟牛顿法具有 $n+1$ 点割线法的效率，同时具备很高的稳定性。

对于给定的一个 $n \times n$ 的非线性方程组

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = [f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x)]^T = 0, \quad (3.45)$$

对应的 Jacobi 矩阵为

$$\mathbf{F}'(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

对于牛顿法， x_0 给定，然后进行迭代

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - [\mathbf{F}'(\mathbf{x}^k)]^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}^k). \quad (3.47)$$

令 $A_k = \mathbf{F}'(\mathbf{x}^k)$ ，则原式为

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - A_k^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}^k), \quad (3.48)$$

3.3.2 拟牛顿法数值方法的介绍

拟牛顿法的基本思路是不断用一个低秩矩阵对 A_k 进行修正，低秩矩阵不同得到的方法也不同。拟牛顿法主要用来解决两类问题，一是 n 个方程 n 个未知数的系统，二是非约束函数的最小值问题。拟牛顿法解决这两类问题时主要的不同在于生成的近似导数矩阵不同，对于非线性问题，采用的是 Jacobian 矩阵，即目标函数的一阶导矩阵，对于非约束最小值问题，采用的是 Hessian 矩阵，即目标函数的二阶导矩阵。对于非约束最小值问题求解的拟牛顿法，其种类是很多的，并且随着机器学习等学科的兴起而不断的增加，但是这些方法之间的关系并不是十分清楚的^[83]。而对于非线性方程求解的拟牛顿方程，主要采用的是 Broyden 方法 (1965)^[77]，而对于非约束最小值问题，则采用 Powell 对称形式的 Broyden 方法^[84]，Davidon-Fletcher-Powell (DFP)^[85-86] 方法以及 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) 方法^[78,87-89]。下面我们介绍 4 种拟牛顿方法的迭代表达式。

(a). Broyden 方法是秩为 1 的算法^[77]

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - B_k^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}^k), \\ B_{k+1} = B_k + \frac{(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k)(\mathbf{s}_k)^T}{(\mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k}, \end{cases} \quad (3.49)$$

这里 B 表示的是目标函数的一阶导矩阵, 即 Jacobian 矩阵, 其中 $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$, $\mathbf{y}_k = \mathbf{F}(\mathbf{x}^{k+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^k)$ 。方程 (3.49) 中要求线性系统 $B_k \mathbf{s}_k = -\mathbf{F}(\mathbf{x}^k)$ 的解, 这个要求是比较难解的。为了克服这个困难, 可以通过 Sherman 和 Morrison 的理论来解决^[90]。该理论得出这样一个定理:

定理 3.1 令 $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ 并假设 $A \in L(\mathbb{R}^n)$ 是非奇异的, 那么 $A + \mathbf{u}\mathbf{v}^T$ 是非奇异的当且仅当 $\sigma = 1 + \mathbf{v}^T A^{-1} \mathbf{u} \neq 0$ 。如果 $\sigma \neq 0$, 那么

$$(A + \mathbf{u}\mathbf{v}^T)^{-1} = A^{-1} - (1/\sigma)A^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T A^{-1}. \quad (3.50)$$

根据这一条定理, 方程 (3.49) 可以写成不含求逆项的方程, 或者在实际迭代过程中只需要一次求逆的迭代表达式。令 $H_{k+1} = B_{k+1}^{-1}$, $H_k = B_k^{-1}$, 根据方程 (3.49) 的第二式以及方程 (3.50), 我们可以得到

$$\begin{aligned} B_{k+1}^{-1} &= \left(B_k + \frac{(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k)(\mathbf{s}_k)^T}{(\mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k} \right)^{-1} \\ &= B_k^{-1} - (1/\sigma)B_k^{-1} \frac{(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k)(\mathbf{s}_k)^T}{(\mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k} B_k^{-1}, \end{aligned}$$

其中

$$\sigma = 1 + \mathbf{s}_k^T B_k^{-1} \frac{\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{s}_k}.$$

则有

$$\begin{aligned} B_{k+1}^{-1} &= B_k^{-1} - \frac{B_k^{-1}(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k)\mathbf{s}_k^T B_k^{-1}}{(1 + \mathbf{s}_k^T B_k^{-1} \frac{\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{s}_k})\mathbf{s}_k^T \mathbf{s}_k} \\ &= B_k^{-1} + \frac{(\mathbf{s}_k - B_k \mathbf{y}_k)\mathbf{s}_k^T B_k^{-1}}{\mathbf{s}_k^T B_k^{-1} \mathbf{y}_k}. \end{aligned}$$

因此可以得到改进的 Broyden 表达式

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - H_k \mathbf{F}(\mathbf{x}^k), \\ H_{k+1} &= H_k + \frac{(\mathbf{s}_k - H_k \mathbf{y}_k)(\mathbf{s}_k)^T H_k}{(\mathbf{s}_k)^T H_k \mathbf{y}_k}. \end{cases} \quad (3.51)$$

对于非约束最小值问题, 采用的是 Hessian 矩阵, 因此, 以下 B 代表的是目标函数的二阶导矩阵, 即 Hessian 矩阵。

(b). Powell 对称形式的 Broyden 方法是一个秩为 2 的算法^[84], 是一个具有对称性的算法

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - B_k^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}^k), \\ B_{k+1} &= B_k + \frac{(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k)\mathbf{s}_k^T + \mathbf{s}_k(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k)^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{s}_k} - \frac{(\mathbf{y}_k - B_k \mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{[(\mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k]^2}. \end{cases} \quad (3.52)$$

(c). Davidon-Fletcher-Powell(DFP) 方法^[85-86]

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - \mathbf{B}_k^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}^k), \\ \mathbf{B}_{k+1} &= \mathbf{B}_k + \frac{(\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k) \mathbf{y}_k^T + \mathbf{y}_k (\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k)^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k} - \frac{(\mathbf{y}_k - \mathbf{B}_k \mathbf{s}_k)^T \mathbf{s}_k \mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T}{[(\mathbf{y}_k)^T \mathbf{s}_k]^2}. \end{cases} \quad (3.53)$$

在对称性的基础上, 还具有继承正定性, 即当 $\mathbf{B}_k$ 为正定的时候, $\mathbf{B}_{k+1}$ 也为正定的。即如果令 $\mathbf{H}_k = \mathbf{B}_k^{-1}$, 可以得到改进的 DFP 方法

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k \mathbf{F}(\mathbf{x}^k), \\ \mathbf{H}_{k+1} &= \mathbf{H}_k + \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} - \frac{\mathbf{H}_k \mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{H}_k}{(\mathbf{y}_k)^T \mathbf{H}_k \mathbf{y}_k}. \end{cases} \quad (3.54)$$

(d). BFGS(Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 方法^[78,87-89]

$$\begin{cases} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - \mathbf{H}_k \mathbf{F}(\mathbf{x}^k), \\ \mathbf{H}_{k+1} &= (\mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{y}_k^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k}) \mathbf{H}_k (\mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k}) + \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{s}_k}. \end{cases} \quad (3.55)$$

BFGS 方法又称为互补 DFP 方法。BFGS 方法的更新矩阵 $\bar{\mathbf{H}}_{BFGS}$ 和 DFP 方法的更新矩阵 $\bar{\mathbf{H}}_{DFP}$ 满足关系式

$$\bar{\mathbf{H}}_{BFGS} = \bar{\mathbf{H}}_{DFP} + \mathbf{v} \mathbf{v}^T, \quad (3.56)$$

其中

$$\mathbf{v} = (\mathbf{y}^T \mathbf{H} \mathbf{y})^{1/2} \left[\frac{\mathbf{s}}{\mathbf{s}^T \mathbf{y}} - \frac{\mathbf{H} \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T \mathbf{H} \mathbf{y}} \right], \quad (3.57)$$

3.4 随机 Runge-Kutta 法计算碰撞部分

作为与分裂法下隐式中点格式算法的对比, 我们来介绍随机 Runge-Kutta 方法下的碰撞算法。并将随机 Runge-Kutta 算法应用于 Lorentzian 等离子体和 Maxwellian 等离子体下 Stratonovich SDE 的求解。下面我们将简要介绍随机 Runge-Kutta 算法, 更详细的内容可以参考附录A。然后得到 Stratonovich SDE 在四级随机 Runge-Kutta 方法下的迭代表达式。

3.4.1 随机 Runge-Kutta 方法的基本介绍

Runge-Kutta 方法将区间 (x_n, x_{n+1}) 上若干条积分曲线在若干个点上的切线斜率进行加权平均, 产生新的斜率, 并按照斜率从 (x_n, y_n) 出发, 沿直线到达 (x_{n+1}, y_{n+1}) , 不断迭代直到得到方程的数值近似解。Runge-Kutta 方法与 Taylor 方法相比不用增加导数次数就可以得到较高的收敛阶数^[91]。高阶随机 Runge-Kutta 方法构造的基本思路是首先将随机微分方程的解析解和 Runge-Kutta 数值解分别

做随机 Taylor 展开, 再根据 Runge-Kutta 方法的阶条件确定 Runge-Kutta 方法中的各个系数。对于随机微分方程

$$dy(t) = f(y(t))dt + g(y(t)) \circ dW(t), \quad y(t_0) = y_0, \quad t \in [0, T], \quad (3.58)$$

其中 $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 为摩擦系数和扩散系数, $W(t)$ 表示 Wiener 过程, 这里我们采用的是 Stratonovich 积分符号, 表示我们采用了 Stratonovich 积分。由方程 (3.58) 构造高阶随机数值算法的难点在于 1. 高阶随机积分的近似很难计算。2. $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 这两个系数函数的导数很难计算。采用阶条件确定 Runge-Kutta 方法系数来构造高阶 Runge-Kutta 方法的复杂度主要是由随机 Taylor 展开以及随机 Taylor 展开中多重随机积分带来的, 参见附录A.1。对于 Stratonovich 多重积分可以采用 Mathematica 来计算, 计算方法如附录A.2。而采用多色有根树理论可以对随机 Taylor 展开以及多重随机积分进行化简, 对多色有根树理论可以参考附录A.3。通过比较随机微分方程解析解和随机 Runge-Kutta 方法 Taylor 展开的式子, 可以得到随机 Runge-Kutta 方法的阶条件。反过来, 根据阶条件所规定的微分方程解析解和数值解的关系, 我们可以确定随机 Runge-Kutta 方法的系数。我们在附录A.4中介绍了 3 种强 1.5 阶 Runge-Kutta 方法, 这些方法都可以用于 Stratonovich SDE 中碰撞部分的计算。

3.4.2 随机 Runge-Kutta 算法在碰撞算法中的应用

根据上面随机 Runge-Kutta 算法的介绍, 针对碰撞部分, 我们可以构造对应的随机 Runge-Kutta 算法。Lorentzian 等离子体的基本方程为拓展到有外场情况, 有

$$d\mathbf{v}_a = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{\mathbf{v}}{v^3} dt - \Omega(\mathbf{v}) \mathbf{v} \times [\mathbf{v} \times d\mathbf{W}] + \frac{\mathbf{F}_L dt}{m_a}, \quad (3.59)$$

式中 $\mathbf{F}_L$ 为洛伦兹力, $\Omega(\mathbf{v}) = \sqrt{\frac{\Gamma_a n_b}{|\mathbf{v}^5|}}$ 。由于 $m_e \ll m_i$, 即 $m_a \ll m_b$, $m_a/m_b \approx 0$

$$\Gamma_a = \frac{z_a^2 z_b^2 e^4}{4\pi \epsilon_0^2 m_a^2} \ln \Lambda, \quad (3.60)$$

对于碰撞部分有

$$\begin{cases} d\mathbf{v}_a = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{\mathbf{v}}{v^3} dt - \Omega(\mathbf{v}) \mathbf{v} \times (\mathbf{v} \times d\mathbf{W}), \\ d\mathbf{x} = \mathbf{v} dt, \end{cases} \quad (3.61)$$

因为速度分量是与坐标解耦的, 因此可以直接演化速度分量。其速度演化方程写为一般形式

$$d\mathbf{v}_a = \mathbf{f}(\mathbf{v})dt + \mathbf{g}(\mathbf{v})d\mathbf{W},$$

将速度写为分量形式得

$$\begin{cases} dv_x = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{v_x}{v^3} dt - \Omega(v)[v_y(v_x dW_y - v_y dW_x) \\ - v_z(v_z dW_x - v_x dW_z)], \\ dv_y = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{v_y}{v^3} dt - \Omega(v)[v_z(v_y dW_z - v_z dW_y) \\ - v_x(v_x dW_y - v_y dW_x)], \\ dv_z = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{v_z}{v^3} dt - \Omega(v)[v_x(v_z dW_x - v_x dW_z) \\ - v_y(v_y dW_z - v_z dW_y)], \end{cases} \quad (3.62)$$

令 $y_1 = v_x$, $y_2 = v_y$, $y_3 = v_z$, $v = \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + y_3^2}$, 则有

$$\begin{cases} dy_1 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_1}{v^3} dt - \Omega(v)[y_2(y_1 dW_y - y_2 dW_x) \\ - y_3(y_3 dW_x - y_1 dW_z)], \\ dy_2 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_2}{v^3} dt - \Omega(v)[y_3(y_2 dW_z - y_3 dW_y) \\ - y_1(y_1 dW_y - y_2 dW_x)], \\ dy_3 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_3}{v^3} dt - \Omega(v)[y_1(y_3 dW_x - y_1 dW_z) \\ - y_2(y_2 dW_z - y_3 dW_y)], \end{cases} \quad (3.63)$$

将方程 (3.63) 写为 Wiener 过程系数形式有

$$\begin{cases} dy_1 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_1}{v^3} dt - \Omega(v)[(-y_2^2 - y_3^2)dW_x + y_2 y_1 dW_y \\ + y_3 y_1 dW_z], \\ dy_2 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_2}{v^3} dt - \Omega(v)[y_1 y_2 dW_x + (-y_3^2 - y_1^2)dW_y \\ + y_2 y_3 dW_z], \\ dy_3 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_3}{v^3} dt - \Omega(v)[y_1 y_3 dW_x + y_2 y_3 dW_y \\ + (-y_2^2 - y_1^2)dW_z], \end{cases} \quad (3.64)$$

即

$$\begin{cases} f_1 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_1}{v^3}, \\ f_2 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_2}{v^3}, \\ f_3 = -\frac{m_a}{m_b} \Gamma_a n_b \frac{y_3}{v^3} \end{cases}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{v}) = -\Omega(v) \begin{bmatrix} (-y_2^2 - y_3^2) & y_1 y_2 & y_1 y_3 \\ y_1 y_2 & (-y_3^2 - y_1^2) & y_2 y_3 \\ y_1 y_3 & y_2 y_3 & (-y_2^2 - y_1^2) \end{bmatrix},$$

对多维 Runge-Kutta 方法有

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j) + \sum_{j=1}^{i-1} g(\mathbf{Y}_j) (b_{ij}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{ij}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}), \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (3.65)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^s \alpha_j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j) + \sum_{j=1}^s g(\mathbf{Y}_j) (\gamma_j^{(1)} \mathbf{J}_1 + \gamma_j^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}). \quad (3.66)$$

$\mathbf{J}_{10}$ 是由 $\mathbf{J}_1$ 累计计算而得的, 因此, 对于时间步为 h , $g_1 \sim N(0, 1)$, $g_2 \sim N(0, 1)$ 时, 有

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_1 &= \sqrt{h} \mathbf{g}_1, \quad \mathbf{g}_1 \sim N(0, 1), \\ \frac{\mathbf{J}_{10}}{h} &= \frac{\sqrt{h}}{2} (\mathbf{g}_1 + \frac{\mathbf{g}_2}{\sqrt{3}}), \quad \mathbf{g}_1 \sim N(0, 1), \mathbf{g}_2 \sim N(0, 1). \end{aligned} \quad (3.67)$$

我们要求解的是 3 维 3 Wiener 过程的 4 级 Runge-Kutta 方法, 将方程 (3.65)-(3.66) 展开得

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{Y}_1 &= \mathbf{y}_n, \\ \mathbf{Y}_2 &= \mathbf{y}_n + h a_{21} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_1) + g(\mathbf{Y}_1) (b_{21}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{21}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}), \\ \mathbf{Y}_3 &= \mathbf{y}_n + h a_{31} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_1) + h a_{32} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_2) + g(\mathbf{Y}_1) (b_{31}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{31}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}) \\ &\quad + g(\mathbf{Y}_2) (b_{32}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{32}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}), \\ \mathbf{Y}_4 &= \mathbf{y}_n + h a_{41} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_1) + h a_{42} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_2) + h a_{43} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_3) + \\ &\quad + g(\mathbf{Y}_1) (b_{41}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{41}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}) + g(\mathbf{Y}_2) (b_{42}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{42}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}) \\ &\quad + g(\mathbf{Y}_3) (b_{43}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{43}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}), \\ \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^s \alpha_j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j) + \sum_{j=1}^s g(\mathbf{Y}_j) (\gamma_j^{(1)} \mathbf{J}_1 + \gamma_j^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}). \end{aligned} \right. \quad (3.68)$$

对无外场 Maxwellian 等离子体的基本方程, 有

$$\begin{aligned} d\mathbf{v} &= [-\frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \\ &\quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \tilde{\mathbf{v}}_a dt \\ &\quad + \mathcal{N}^{1/2} d\mathbf{W} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times d\mathbf{W})}{\tilde{v}_a^2}]. \end{aligned} \quad (3.69)$$

其中

$$\mathcal{M} = \Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2} v_{Tb}} \frac{\Phi(\eta) - \Psi(\eta)}{\eta}, \quad (3.70)$$

$$\mathcal{N} = 2\Gamma_a n_b \frac{1}{\sqrt{2v_{Tb}}} \frac{\Psi(\eta)}{\eta}, \quad (3.71)$$

$$\mathcal{M}' = \Gamma_a n_b \frac{1}{2v_{Tb}^2} \frac{1}{\eta^2} [3\Psi(\eta) - \Phi(\eta)], \quad (3.72)$$

$$\mathcal{N}' = 2\Gamma_a n_b \frac{1}{2v_{Tb}^2} \frac{\Phi(\eta) - (2\eta^2 + 3)\Psi(\eta)}{\eta^2}, \quad (3.73)$$

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-y^2} dy. \quad (3.74)$$

$$\Phi'(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}, \quad (3.75)$$

$$\begin{aligned} \Psi(\eta) &= -\frac{1}{2} \frac{d(\Phi(\eta)/\eta)}{d\eta} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\eta^2} \Phi(\eta) - \frac{1}{2} \frac{1}{\eta} \Phi'(\eta), \end{aligned} \quad (3.76)$$

$$\eta = \frac{\tilde{v}_a}{\sqrt{2v_{Tb}}}, \quad (3.77)$$

$$\tilde{v}_a = |\mathbf{v}_a - \bar{\mathbf{v}}|, \quad (3.78)$$

将方程 (3.69) 写成分量形式得

$$\left\{ \begin{aligned} dv_{ax} &= \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ &\quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \} \tilde{v}_{ax} dt \\ &\quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_x - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} [\tilde{v}_{ay}(\tilde{v}_{ax} dW_y - \tilde{v}_{ay} dW_x) \\ &\quad - \tilde{v}_{az}(\tilde{v}_{az} dW_x - \tilde{v}_{ax} dW_z)], \\ dv_{ay} &= \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ &\quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \} \tilde{v}_{ay} dt \\ &\quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_y - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} [\tilde{v}_{az}(\tilde{v}_{ay} dW_z - \tilde{v}_{az} dW_y) \\ &\quad - \tilde{v}_{ax}(\tilde{v}_{ax} dW_y - \tilde{v}_{ay} dW_x)], \\ dv_{az} &= \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ &\quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \} \tilde{v}_{az} dt \\ &\quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_z - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} [\tilde{v}_{ax}(\tilde{v}_{az} dW_x - \tilde{v}_{ax} dW_z) \\ &\quad - \tilde{v}_{ay}(\tilde{v}_{ay} dW_z - \tilde{v}_{az} dW_y)], \end{aligned} \right. \quad (3.79)$$

令 $y_{a1} = v_{ax}$, $y_{a2} = v_{ay}$, $y_{a3} = v_{az}$, $y_1 = \tilde{v}_{ax}$, $y_2 = \tilde{v}_{ay}$, $y_3 = \tilde{v}_{az}$, $v = \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + y_3^2}$, 则有

$$\left\{ \begin{array}{l} dy_{a1} = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_1 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_x - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) [(-y_2^2 - y_3^2) dW_x + y_2 y_1 dW_y \\ \quad + y_3 y_1 dW_z], \\ dy_{a2} = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_2 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_y - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} [y_1 y_2 dW_x + (-y_3^2 - y_1^2) dW_y \\ \quad + y_2 y_3 dW_z], \\ dy_{a3} = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_3 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_z - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} [y_1 y_3 dW_x + y_2 y_3 dW_y \\ \quad + (-y_2^2 - y_1^2) dW_z], \end{array} \right. \quad (3.80)$$

将方程 (3.80) 写成 Wiener 过程系数形式, 有

$$\left\{ \begin{array}{l} dy_{a1} = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_1 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_x - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) [(-y_2^2 - y_3^2) dW_x + y_2 y_1 dW_y \\ \quad + y_3 y_1 dW_z], \\ dy_{a2} = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_2 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_y - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} [y_1 y_2 dW_x + (-y_3^2 - y_1^2) dW_y \\ \quad + y_2 y_3 dW_z], \\ dy_{a3} = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_3 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_z - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} [y_1 y_3 dW_x + y_2 y_3 dW_y \\ \quad + (-y_2^2 - y_1^2) dW_z], \end{array} \right. \quad (3.81)$$

即

$$\begin{cases} f_1 = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad \left. + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \right\} y_1, \\ f_2 = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad \left. + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \right\} y_2, \\ f_3 = \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad \left. + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \right\} y_3, \end{cases}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}) = \mathcal{N}^{1/2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} \begin{bmatrix} (-y_2^2 - y_3^2) & y_1 y_2 & y_1 y_3 \\ y_1 y_2 & (-y_3^2 - y_1^2) & y_2 y_3 \\ y_1 y_3 & y_2 y_3 & (-y_2^2 - y_1^2) \end{bmatrix},$$

对多维 Runge-Kutta 方法有

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j) + \sum_{j=1}^{i-1} g(\mathbf{Y}_j) (b_{ij}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{ij}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}), \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (3.82)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^s \alpha_j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j) + \sum_{j=1}^s g(\mathbf{Y}_j) (\gamma_j^{(1)} \mathbf{J}_1 + \gamma_j^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}). \quad (3.83)$$

类比于方程 (3.67)-(3.68) 得到对应的 Runge-Kutta 各级表达式。

对 Maxwellian 的基本方程为拓展到有外场情况，有

$$\begin{aligned} d\mathbf{v} = & \frac{q}{m_a} E + \frac{q}{m_a} (\mathbf{v}_a \times \mathbf{B}) + \left[-\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ & + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \tilde{\mathbf{v}}_a dt \\ & \left. + \mathcal{N}^{1/2} d\mathbf{W} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{\tilde{\mathbf{v}}_a \times (\tilde{\mathbf{v}}_a \times d\mathbf{W})}{\tilde{v}_a^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.84)$$

将方程 (3.84) 写成分量形式得令 $y_{a1} = v_{ax}$, $y_{a2} = v_{ay}$, $y_{a3} = v_{az}$, $y_1 = \tilde{v}_{ax}$, $y_2 =$

$\tilde{v}_{ay}, y_3 = \tilde{v}_{az}, v = \sqrt{y_1^2 + y_2^2 + y_3^2}$, 则有

$$\left\{ \begin{array}{l} dv_{ax} = \frac{q}{m_a} E_x dt + (v_y B_z - v_z B_y) dt + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \} \tilde{v}_{ax} dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_x - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} [\tilde{v}_{ay}(\tilde{v}_{ax} dW_y - \tilde{v}_{ay} dW_x) \\ \quad - \tilde{v}_{az}(\tilde{v}_{az} dW_x - \tilde{v}_{ax} dW_z)], \\ dv_{ay} = \frac{q}{m_a} E_y dt + (v_z B_x - v_x B_z) dt + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \} \tilde{v}_{ay} dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_y - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} [\tilde{v}_{az}(\tilde{v}_{ay} dW_z - \tilde{v}_{az} dW_y) \\ \quad - \tilde{v}_{ax}(\tilde{v}_{ax} dW_y - \tilde{v}_{ay} dW_x)], \\ dv_{az} = \frac{q}{m_a} E_z dt + (v_x B_y - v_y B_x) dt + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{\tilde{v}_a} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{\tilde{v}_a^2} \} \tilde{v}_{az} dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_z - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{\tilde{v}_a^2} [\tilde{v}_{ax}(\tilde{v}_{az} dW_x - \tilde{v}_{ax} dW_z) \\ \quad - \tilde{v}_{ay}(\tilde{v}_{ay} dW_z - \tilde{v}_{az} dW_y)], \end{array} \right. \quad (3.85)$$

将方程 (3.85) 写成 Wiener 过程系数形式, 有

$$\left\{ \begin{array}{l} dy_{a1} = \frac{q}{m_a} E_x dt + (y_{a2} B_z - y_{a3} B_y) dt + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_1 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_x - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} [y_2(y_1 dW_y - y_2 dW_x) \\ \quad - y_3(y_3 dW_x - y_1 dW_z)], \\ dy_{a2} = \frac{q}{m_a} E_y dt + (y_{a3} B_x - y_{a1} B_z) dt + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_2 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_y - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} [y_3(y_2 dW_z - y_3 dW_y) \\ \quad - y_1(y_1 dW_y - y_2 dW_x)], \\ dy_{a3} = \frac{q}{m_a} E_z dt + (y_{a1} B_y - y_{a2} B_x) dt + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \} y_3 dt \\ \quad + \mathcal{N}^{1/2} dW_z - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} [y_1(y_3 dW_x - y_1 dW_z) \\ \quad - y_2(y_2 dW_z - y_3 dW_y)], \end{array} \right. \quad (3.86)$$

即

$$\begin{cases} f_1 = \frac{q}{m_a} E_x + (y_{a2} B_z - y_{a3} B_y) + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad \left. + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \right\} y_1, \\ f_2 = \frac{q}{m_a} E_y + (y_{a3} B_x - y_{a1} B_z) + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad \left. + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \right\} y_2, \\ f_3 = \frac{q}{m_a} E_z + (y_{a1} B_y - y_{a2} B_x) + \left\{ -\frac{m_a+m_b}{m_b} \frac{1}{2v_{Tb}^2} \mathcal{N} - \frac{1}{4} \frac{1}{v} \mathcal{N}' \right. \\ \quad \left. + [\mathcal{M} - (\mathcal{M}\mathcal{N})^{1/2}] \frac{1}{v^2} \right\} y_3, \end{cases}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}) = \mathcal{N}^{1/2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - (\mathcal{M}^{1/2} - \mathcal{N}^{1/2}) \frac{1}{v^2} \begin{bmatrix} (-y_2^2 - y_3^2) & y_1 y_2 & y_1 y_3 \\ y_1 y_2 & (-y_3^2 - y_1^2) & y_2 y_3 \\ y_1 y_3 & y_2 y_3 & (-y_2^2 - y_1^2) \end{bmatrix},$$

对多维 Runge-Kutta 方法有

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j) + \sum_{j=1}^{i-1} g(\mathbf{Y}_j) (b_{ij}^{(1)} \mathbf{J}_1 + b_{ij}^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}), \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (3.87)$$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \sum_{j=1}^s \alpha_j \mathbf{f}(\mathbf{Y}_j) + \sum_{j=1}^s g(\mathbf{Y}_j) (\gamma_j^{(1)} \mathbf{J}_1 + \gamma_j^{(2)} \frac{\mathbf{J}_{10}}{h}). \quad (3.88)$$

类比于方程 (3.67)-(3.68) 得到对应的 Runge-Kutta 各级表达式。

3.5 ISSDE 模拟程序的程序设计

ISSDE 模拟程序是采用 C++ 实现的并且可以直接使用到类 Unix 的操作系统。对于非类 Unix 系统, 用户可以通过类 Unix 兼容层来构建 ISSDE, 比如 Cygwin 和 MSYS。ISSDE 由 I/O 模块, 初始化模块, 推粒子模块, 并行模块, 场配置模块, 外力场模块以及其他可扩展模块构成。I/O 模块从 Lua^[92] 和 HDF5^[93] 程序调用库函数。输入文件采用 Lua 文件脚本这样可以方便用户设置参数和物理问题, 提高程序的编译效率。输出数据采用 HDF5 格式记录和存储, 主要基于 HDF5 格式的如下优势, 首先 HDF5 格式采用层次式的逻辑结构、B 树物理存储方式; 其次 HDF5 格式具有面向对象的特性, 对数据类型的广泛支持; 最后它具有自我表述以及内容与表达的分离的特点。初始化模块提供了一些静态采样的方法, 对粒子系综的初始分布函数进行设置。推粒子模块将根据分裂法, Newton-Raphson 法和拟牛顿法进行计算, 并且提供其他类型的推粒子函数, 比如无碰撞的保体积算法, Runge-Kutta 算法等等。并行模块采用调用 OPENMPI, 可以将多个粒子的采样并行处理, 加快程序计算。场配置和外力场配置模块包括多种位形的电磁场

和外场，例如辐射场、重力场等。可扩展模型是采用 Bash 语言书写的脚本模块，可以增强 ISSDE 模拟程序的可扩展性^[16]。

3.6 ISSDE 程序流程图

如图3.4为 ISSDE 程序的流程图，并程序运行过程中将分为多个线程同时运行，每一个线程都为单个粒子的演化。在 I/O 设置中分为 Lua 文件的输入和 HDF5 文件的输出。Lua 文件中包含程序运行的基本参数，背景等离子体基本物理参数，例如等离子体密度、温度等，各种位形外场的选择开关，以及带电粒子基本参数等，由 EFIT 计算出的平衡位型的参数和 NUBEAM 计算出的快离子初始位置分布和速度分布也会作为初始输入参数。HDF5 文件中结构化存储了每一个粒子每一时刻在相空间的坐标和速度信息。粒子受到碰撞作用的信息包含在对应的碰撞系数中，而随机过程与 Wiener 过程相关，可以根据 Wiener 过程的定义得到 Wiener 过程的每一时刻的值 W_t 。Wiener 过程为一个随机过程，其初值 $W_0 = 0$ ，其增量为随机变量，并服从方差为 dt ，均值为 0 的正态分布。利用定义在一时刻生成均值为 0，方差为 dt 的一个随机变量，在将该随机变量带入到主循环的拟牛顿法中去。初始参数设置目的在于初始化带电粒子参数，如粒子的初始位置分布、初始速度分布等，这些分布可以直接设置或由 NUBEAM 对应接口输入，为粒子演化循环做准备。主循环为带电粒子在外场和由碰撞而产生随机力作用下的演化，并根据需求对所需的数据进行存储。主循环中的求解 Stratonovich SDE 的迭代过程由图3.4的右图所示^[16]。

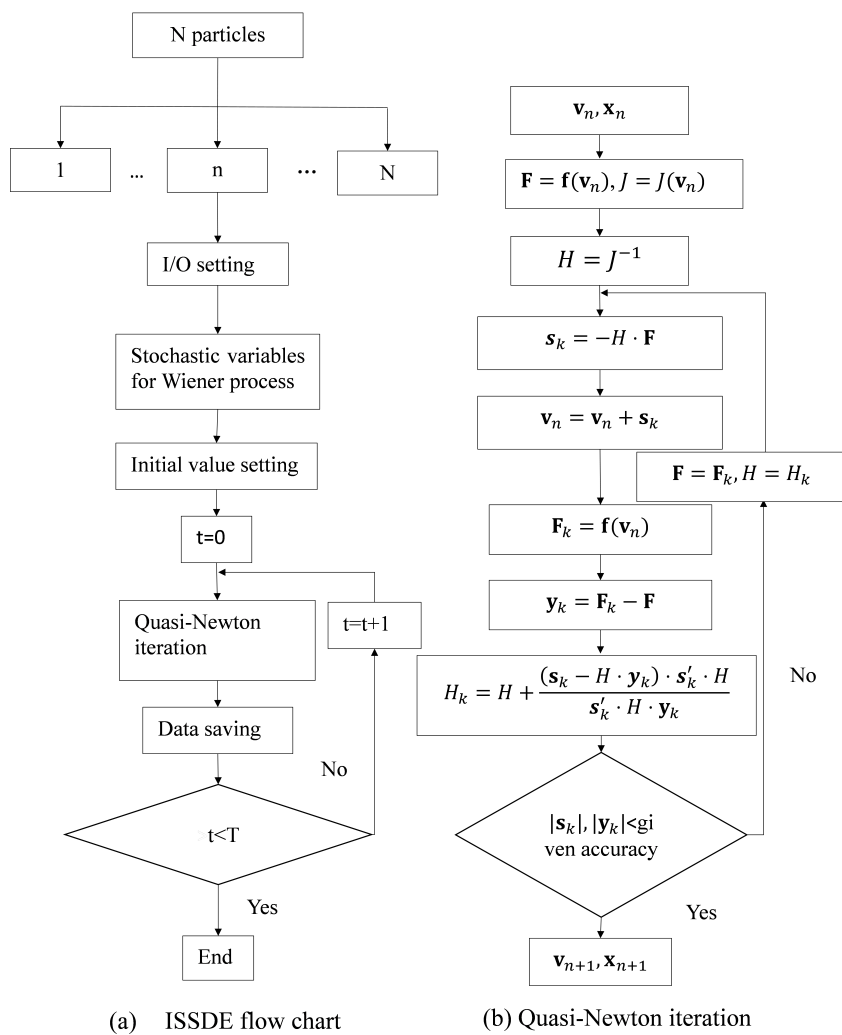


图 3.4 图 (a) 为 ISSDE 程序流程图, 图 (b) 为 Newton-Raphson 方法演化迭代过程

第4章 等离子体中的弛豫过程

将等离子体加热有多种方式,除了欧姆加热还有很多辅助加热形式,例如离子回旋波共振加热,低杂波共振加热,电子回旋波共振加热以及中性束注入加热。在非磁化等离子体中,采用高能电子束入射到致密等离子体进行加热也是一种可行的机制。热核聚变反应产生的 α 粒子在等离子体中的能量是点火之后维持聚变持续燃烧的重要能量来源。在这些过程中高能粒子都要和背景等离子体发生碰撞而经历弛豫过程,因此对等离子体弛豫过程的研究是非常重要的。在本章节中我们首先采用 ISSDE 模拟电子束在非磁化和磁化 Lorentzian 等离子体中的慢化过程,并与 FP 方程的解析数值解进行比较,由此我们来验证 ISSDE 的正确性。根据简化的 Lorentzian 等离子体中动能守恒的性质,我们可以比较采用分裂法和采用全 Runge-Kutta 法对应的能量误差,由此验证 ISSDE 数值计算的长期稳定性。作为 benchmark,我们计算 Maxwellian 分布电子与背景 Maxwellian 分布电子的弛豫过程。然后我们计算电子束在背景 Maxwellian 电子中受碰撞的慢化过程,离子束在 Maxwellian 电子中受碰撞的慢化过程,并对入射粒子系综做系综平均得到系综平均物理量随时间的演化。

4.1 电子束在 Lorentzian 等离子体中的慢化过程

在试探粒子慢化过程的计算中,我们只考虑背景粒子对入射粒子的相互作用,不考虑入射粒子对背景粒子的反作用,也不考虑入射粒子之间的相互作用。试探粒子初始时刻在速度空间以相同的速度入射,其分布函数为

$$f_a(\mathbf{v}, t=0) = n_a \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0), \quad \mathbf{v}_0 = v_0 \mathbf{e}_1, \quad (4.1)$$

其中下标 a 表示试探粒子, n_a 为试探粒子的粒子数密度, $\mathbf{v}_0$ 为粒子在 $t=0$ 时刻的速度, $\mathbf{e}_1$ 为初始入射方向。试探粒子所满足的 FP 方程的一般表达式为

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m_a} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = \left(\frac{\delta f_a}{\delta t} \right)_c = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \cdot \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_a} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} : \left(f_a \Gamma_a \frac{\partial^2 G_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} \right). \quad (4.2)$$

4.1.1 FP 方程的理论近似结果

假设在背景等离子体中没有外场,即 $\mathbf{E} = 0, \mathbf{B} = 0$, 则有 $\mathbf{F} = 0$, 因为只考虑背景等离子体对入射粒子的散射过程,因此入射粒子的分布函数只为速度和时间的函数即 $f_a = f(\mathbf{v}, t)$, 因此 $\frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} = 0$ 。带入方程 (4.2) 左边得

$$\left(\frac{\delta f_a}{\delta t} \right)_c = \frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = \frac{\partial f_a}{\partial t}, \quad (4.3)$$

所以，试探粒子所满足的 FP 方程为

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \cdot (f_a \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} : (f_a \Gamma_a \frac{\partial^2 \mathbf{G}_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a}), \quad (4.4)$$

将 f_a 的具体形式代入，方程左右乘上 $\mathbf{v}_a$ 再进行积分得

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_0 = \Gamma_a \frac{\partial \mathcal{H}_a}{\partial \mathbf{v}_a} |_{v_a=v_0} = \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_b} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{|v_0 - v_b|}. \quad (4.5)$$

对 Lorentizan 等离子体，其分布满足

$$f_b(\mathbf{v}_b, t=0) = n_b \delta(\mathbf{v}_b - \mathbf{v}_{b0}), \quad (4.6)$$

n_b 为背景粒子的粒子数密度， $\mathbf{v}_{b0}$ 表示背景等离子体粒子的速度。因此对应的 Rosenbluth 势为

$$\mathcal{H}_a(\mathbf{v}_b) = \frac{m_a + m_b}{m_b} \sum_b |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_{b0}|, \quad (4.7)$$

将方程 (4.6) 代入方程 (4.5) 得

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} = -\Gamma_a n_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{b0}}{|\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{b0}|^3}, \quad (4.8)$$

我们可以定义慢化时间为

$$\tau_s(\mathbf{v}_0) = -\frac{\mathbf{v}_0}{\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t}}, \quad (4.9)$$

对应的慢化频率为^[94]

$$\nu_s(\mathbf{v}_0) = n_b \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_a} \frac{\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{b0}}{v_0 |\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{b0}|^3}. \quad (4.10)$$

慢化频率是背景等离子体密度，温度和入射等离子体速度的函数。慢化时间也是背景等离子体密度，温度和入射等离子体速度的函数。其函数关系如下图所示在图4.1中，当背景等离子体温度固定 $T_e = 4eV$ ，慢化时间作为背景等离子体密度的函数，以入射粒子初始能量 $V_p = \frac{1}{2}mv_p^2$ 作为参数，其中 V_p 为粒子动能， $\mathbf{v}_p$ 为粒子速度。入射粒子以某一初始动能入射到等离子体中时，随着背景等离子体密度的增加，慢化时间逐渐减小。这表明当背景等离子体越致密，入射粒子在单位时间内受到碰撞越多。

在图4.2中，当背景等离子体温度固定为 $T_e = 4eV$ ，慢化时间作为入射粒子初始动能的函数，将等离子体密度作为参数。在某一背景等离子体密度下，随着入射粒子初始动能的增大，慢化时间逐渐增大。这表明当入射粒子初始动能越大时，入射粒子在单位时间内受到的碰撞减少了。这主要是因为随着入射粒子速度的增大，相应的碰撞截面减小了。此解与 D. M. Goebel, and I. Katz (2008) 中的解是一致的^[95]。

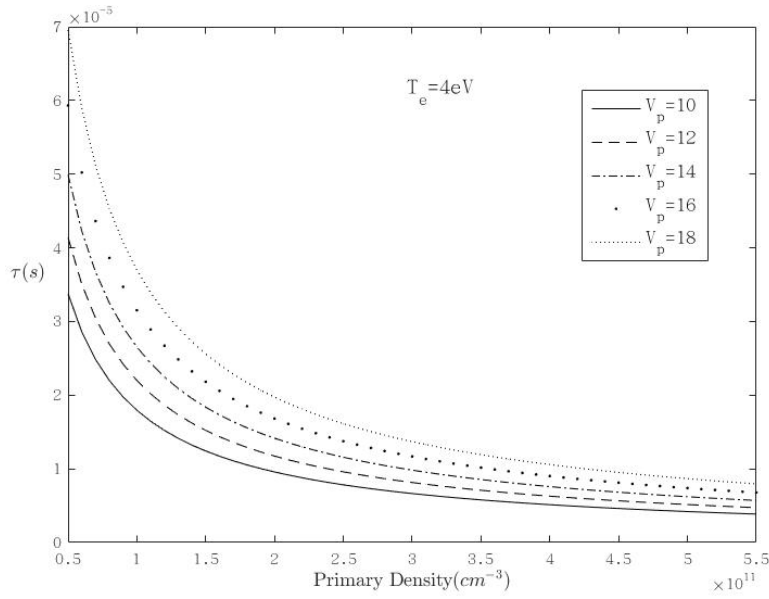


图 4.1 入射粒子在不同初始动能下，慢化时间随背景等离子体密度的变化曲线，入射粒子初始动能的单位为 eV。

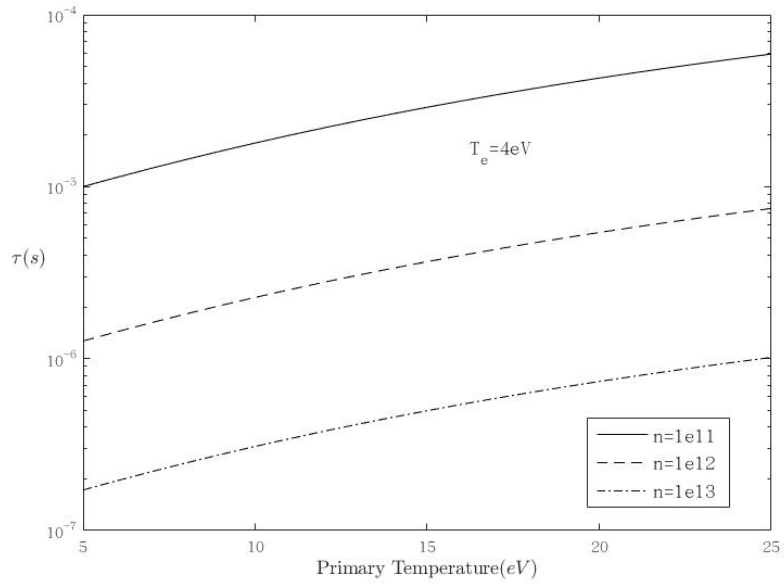


图 4.2 背景等离子体不同密度下，慢化时间随粒子入射初始动能的变化曲线。

4.1.2 ISSDE 在非磁化 Lorentzian 等离子体中的数值结果

在得到非磁化等离子体中入射粒子的理论结果后，我们下面采用 ISSDE 模拟程序在一定的初始条件下对电子入射到致密 Lorentzian 等离子体中的慢化过程进行数值模拟。我们将首先得到在含有碰撞情况下，单个粒子在背景等离子体的演化，分别得到三维位置空间和三维速度空间中的粒子轨迹。然后我们增加粒子数目，并且在电子入射速度方向对速度取系综平均，再与相同参数下 FP 所得慢化过程理论结果进行对比，以验证 ISSDE 的正确性。

表 4.1 无磁场下试探粒子慢化过程参数，其中 τ_{ei} 表示电子和离子的碰撞频率

参数	数值
初始位置 (m)	(0, 0, 0)
初始速度 (m/s)	(5×10^6)
时间步长 (s)	τ_{ei}
初始磁场 (T)	(0, 0, 0)
等体密度 (cm^{-3})	1.6×10^{15}
等体温度 (eV)	8
初始电场 (V/m)	(0, 0, 0)
总步长数	5000

数值实验的参数如表4.1，其中 α 粒子和 β 粒子的碰撞时间为

$$\tau_{\alpha\beta} = \frac{3\sqrt{m_\alpha} T_\alpha^{3/2} \epsilon_0}{4\sqrt{2\pi} z_\alpha^2 z_\beta^2 \ln \Lambda e^4 n_\beta}, \quad (4.11)$$

采用 ISSDE 模拟程序得到三维位置空间中单个电子在碰撞作用下的运动轨迹如图4.3。可以看出，带电粒子在碰撞的作用下作随机运动。然后得到三维速度空间中单个电子的运动轨迹如图4.4，因为对于简化的 Lorentzian 等离子体，碰撞随机力只改变粒子速度方向而不改变速度大小，因此粒子是保持动能守恒的，在速度空间在固定球面上进行随机运动。

采用 ISSDE 模拟程序采样 10000 个粒子，将时间步长取为 $\Delta t = 0.1\tau_{ei}$ ，所得速度空间的粒子系的演化如图4.5。因为粒子系初始速度都为 5×10^6 m/s，因此粒子系在速度空间是各向异性的，如图 (a)，为粒子系演化 10 个时间步长后在速度空间的分布。随着粒子系的演化，在碰撞作用下，粒子系在速度空间的逐渐趋于各向同性分布，如图 (b)、(c)、(d) 所示，分别为粒子系演化 50 个时间步，100 个时间步和 500 个时间步时在速度空间的分布。碰撞能够使粒子系在速度空间发生扩散，分布函数逐渐由各向异性分布变为各向同性分布。

粒子系速度在 $x - y$ 方向和 $y - z$ 方向速度空间的分布函数演化图分别如图4.6和图4.7，在 $x - y$ 方向，初始时刻，粒子系 x 方向速度分布函数的展宽逐渐

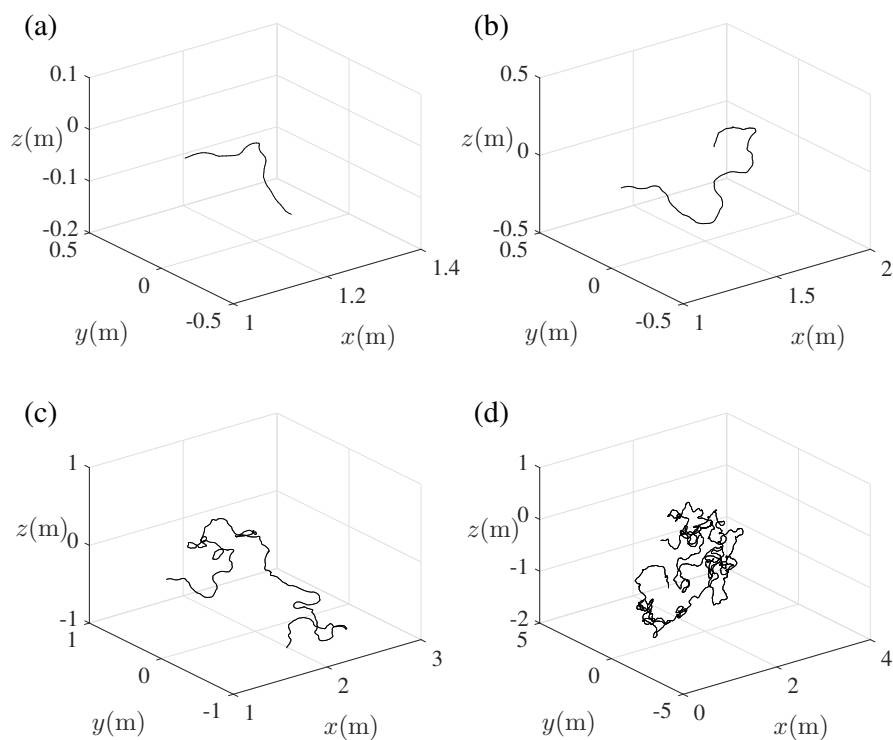


图 4.3 采用 ISSDE 模拟程序得到不同时刻单个粒子在三维位置空间的随机演化行为。

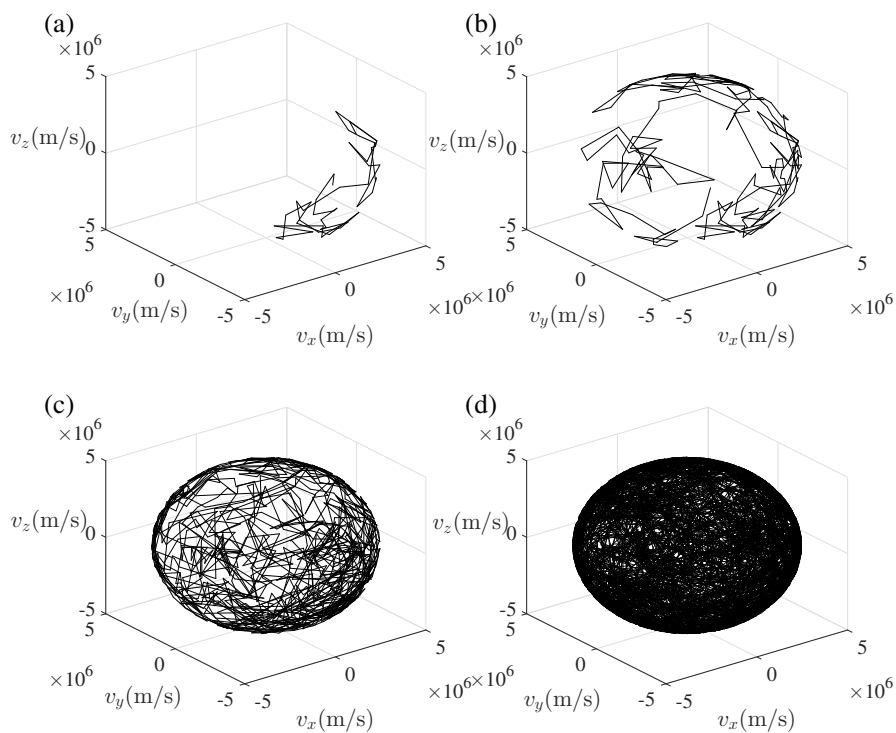


图 4.4 采用 ISSDE 模拟程序得到不同时刻单个粒子在三维速度空间的随机演化行为。

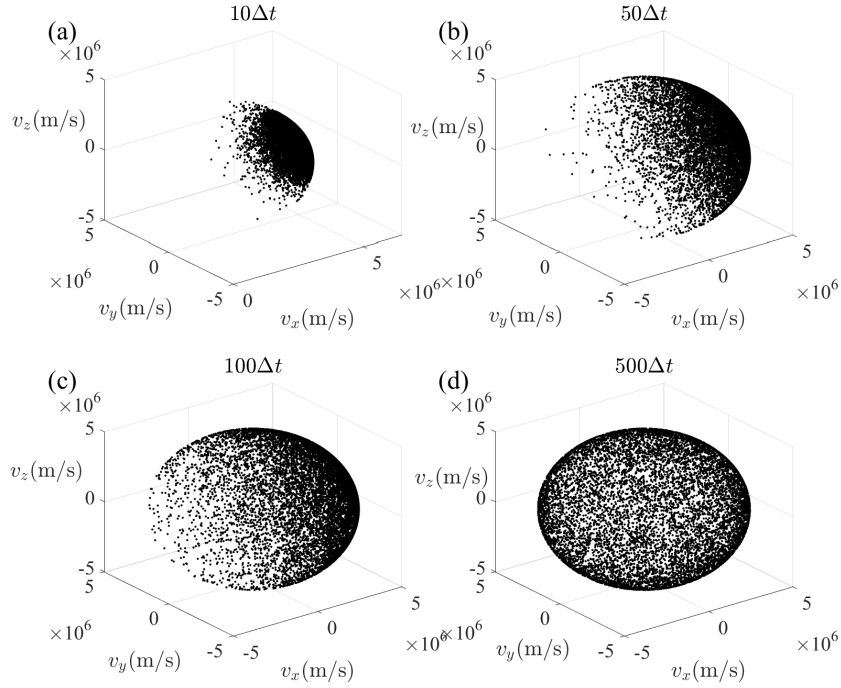


图 4.5 ISSDE 模拟程序对粒子系综在速度空间演化的模拟。粒子在一个半径为 5×10^6 m/s 的球面上演化。

变大，但因为每个粒子都是动能守恒的，因此粒子的速度大小上限为 5×10^6 m/s，粒子在 x 方向速度也将小于 5×10^6 m/s，但是出现了小于 5×10^6 m/s 的成分。由于碰撞相互作用，使粒子在 y 方向具有一个速度分布，因为粒子在 y 方向的碰撞是各向同性的，因此， y 方向速度分布函数是关于 $v_y = 0$ m/s 对称的，如图 (a), (b) 所示。随着慢化过程的不断进行，粒子系在 x 方向也逐渐趋于关于 $v_x = 0$ m/s 的对称分布，如图 (d) 所示为经过 $500\Delta t$ 后粒子系速度分布。在 $y-z$ 方向粒子系速度分布在初始时刻是各向同性的，大部分粒子的速度大小由 0 m/s 逐渐增大，如图 4.7 中图 (a), (b) 所示。随着慢化过程的不断进行，粒子系在 $y-z$ 方向的速度分布也逐渐趋于均匀分布。这个过程表明因为碰撞的影响，粒子系在 x 方向的速度发生慢化，而因为单个粒子在碰撞过程中动能守恒，粒子系 x 方向的动量向 y 方向和 z 方向转移^[16]。

采用如表 4.2 所示的参数，采用 10048 个粒子，并对整个入射粒子系综做统计平均，得到入射粒子系综平行入射方向平均速度的演化如图 4.8。ISSDE 程序模拟的结果用点线表示，实线表示由 FP 方程所得慢化过程的结果，即方程 (4.9) 所描述的结果是吻合的。入射粒子系平行入射方向的平均速度逐渐减小，然后趋于平稳。这个结果与 Sherlock(2008)^[46] 采用不同方法对慢化过程的描述的结果是一致的。由此可以证明采用 ISSDE 模拟程序计算慢化过程的正确性^[16]。

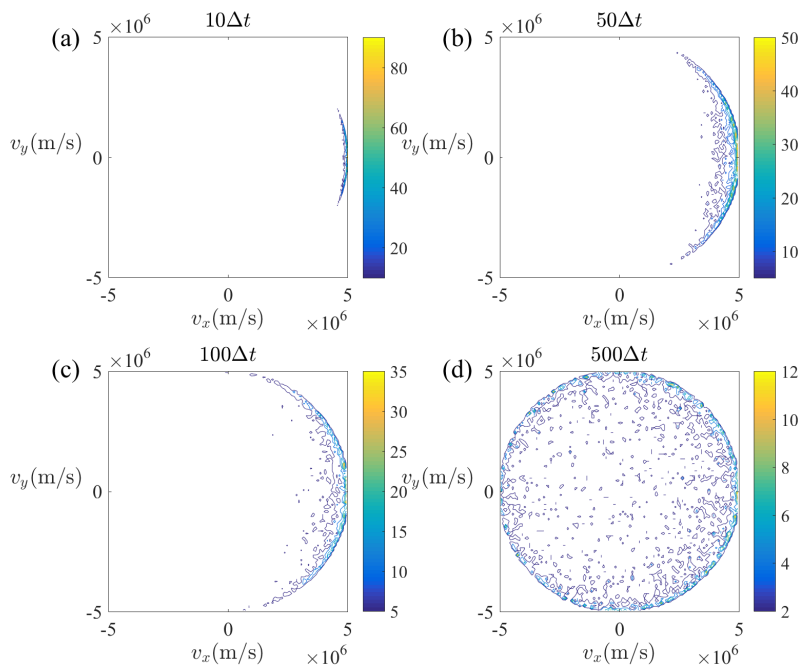
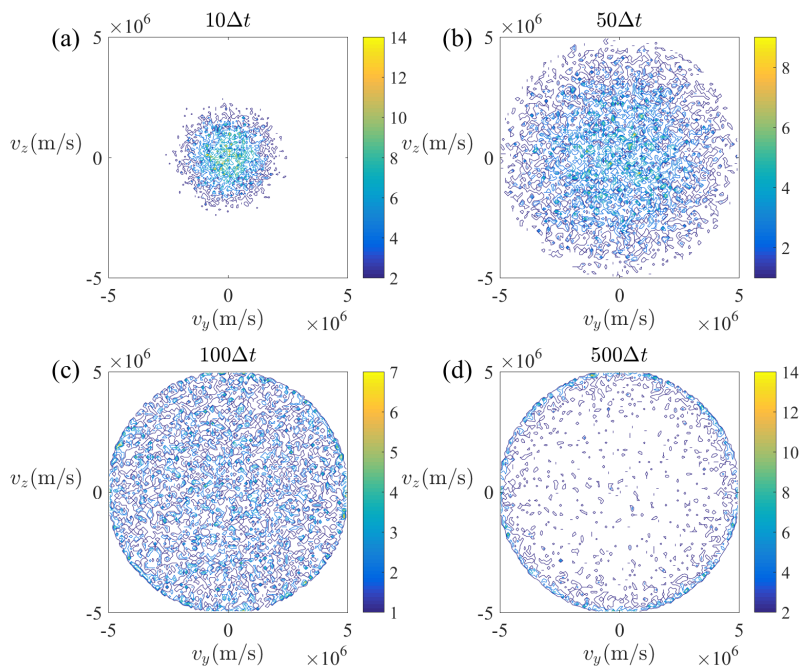

 图 4.6 非磁化等离子体中粒子系速度在 x - y 速度空间分布函数演化的 contour 图。

 图 4.7 非磁化等离子体中粒子系速度在 y - z 速度空间分布函数演化的 contour 图。

表 4.2 无磁场下试探粒子慢化过程参数

参数	数值
初始位置 (m)	(1.05, 0, 0)
初始速度 (m/s)	(5.5×10^6)
时间步长 (s)	$1 \times 10^{-3} \tau_{ei}$
初始磁场 (T)	(0, 0, 0)
等体密度 (cm^{-3})	1.5×10^{14}
等体温度 (eV)	8
初始电场 (V/m)	(0, 0, 0)
总步长数	80000

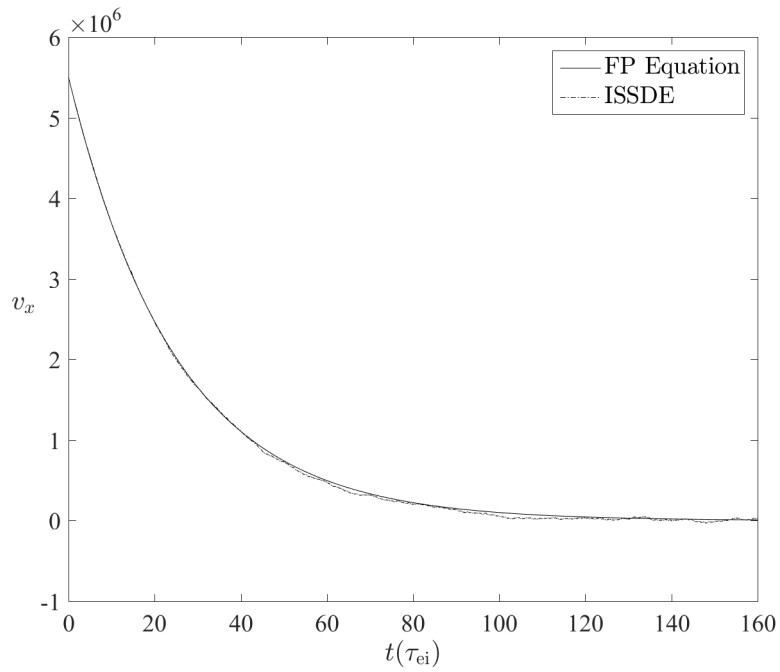


图 4.8 非磁化背景等离子体中入射电子沿入射方向的慢化过程，其中实线为 FP 方程的解，点线为 ISSDE 模拟程序给出结果。

4.1.3 ISSDE 在磁化 Lorentzian 等离子体中的数值结果

对于磁化等离子体中的弛豫过程,则在方程的 (3.5) 的第一式加入外场 $\mathbf{F}_L$ 的影响,在 ISSDE 中利用分裂法来处理外场的影响。而采用 FP 方程求解却变得复杂,因此类似于 Stratonovich SDE 方程的求解,下面我们先采用 Newton-Raphson 方法求解出磁化等离子体中 FP 方程的解,再与 ISSDE 所求得结果的系综平均进行对比。

假设在背景等离子体处在外电磁场下,即 $\mathbf{E} \neq 0, \mathbf{B} \neq 0$, 则有 $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$, 因此

$$\left(\frac{\delta f_a}{\delta t}\right)_c = \frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_a \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = \frac{\partial f_a}{\partial t} + \frac{q}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_a \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a}, \quad (4.12)$$

所以,试探粒子所满足的 FP 方程为

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_a \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \cdot (f_a \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_a}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a} : (f_a \Gamma_a \frac{\partial^2 G_a}{\partial \mathbf{v}_a \partial \mathbf{v}_a}), \quad (4.13)$$

将 f_a 的具体形式代入,方程左右乘上 v_a 再进行积分得

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} = -\frac{q}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B}) + \Gamma_a \frac{\partial H_a}{\partial \mathbf{v}_a} \Big|_{\mathbf{v}_a = \mathbf{v}_0} = -\frac{q}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B}) + \Gamma_a \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_0} \int d\mathbf{v}_b f_b(\mathbf{v}_b) \frac{1}{|\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_b|}. \quad (4.14)$$

对 Lorentzian 等离子体,根据方程 (4.8),对方程有右边第三项进行积分后最终得

$$\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} = -\frac{q}{m}\mathbf{E} + \frac{q}{m}\mathbf{v}_0 \times \mathbf{B} - \Gamma_a n_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{b0}}{|\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}_{b0}|^3}, \quad (4.15)$$

上述方程进行采用中点格式和 Newton-Raphson 方法迭代求解有目标函数

$$\mathbf{g}(\mathbf{v}_0^{n+1}) = -\mathbf{v}_0^{n+1} + \mathbf{v}_0^n - \frac{q}{m}\mathbf{E} - \frac{q}{m} \frac{\mathbf{v}_0^{n+1} + \mathbf{v}_0^n}{2} \times \mathbf{B} - \Gamma_a n_b \frac{m_a + m_b}{m_b} \frac{\frac{\mathbf{v}_0^{n+1} + \mathbf{v}_0^n}{2} - \mathbf{v}_{b0}}{|\frac{\mathbf{v}_0^{n+1} + \mathbf{v}_0^n}{2} - \mathbf{v}_{b0}|^3}, \quad (4.16)$$

Jacobi 变换矩阵为

$$\mathbf{J} = \left[\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{v}_0^{n+1})}{\partial \mathbf{v}_0^{n+1}} \right], \quad (4.17)$$

令 $\mathbf{J}^- = \mathbf{J}^{-1}$, 给定初值 $\mathbf{v}^0 = (v_x^0, v_y^0, v_z^0)$, 根据迭代式

$$\mathbf{v}_0^{n+1} = \mathbf{v}_0^n - \mathbf{J}^- \mathbf{g}(\mathbf{v}_0^{n+1}), \quad (4.18)$$

便可以得到 $(v_{0x}^{n+1}, v_{0y}^{n+1}, v_{0z}^{n+1})$, 反复迭代,直到 v_0^{n+1} 与 v_0^n 的误差小于给定精度。

现在令电场为 $\mathbf{E} = 0$, 磁场 $\mathbf{B}$ 沿着 z 方向,大小为 $1 \times 10^{-3} T$, 其它参数如表4.1, 采用 ISSDE 模拟单个带电粒子磁化等离子体受碰撞影响的运动轨迹。单个粒子在三维位置空间的轨迹如图4.9。与单个粒子在非磁化等离子体中的轨迹

不同，在磁化等离子体中，单个带电粒子体现出回旋运动和随机运动两种属性。单个粒子在 $x-y$ 方向受到 z 方向磁场的约束而作回旋运动，因此带电粒子在 $x-y$ 方向的运动范围相比较无磁场的情况更小。而因为磁场对带电粒子在 z 方向的运动没有影响，其运动范围相比较无磁场的情况变化不大。单个带电粒子在三维速度空间的演化如图4.10。由图 (a) 可以看出，单个带电粒子在速度空间的演化也是在一个半径为 5×10^6 m/s 的球面上的。不同于非磁化等离子体中的情况，在磁化等离子体中，带电粒子速度在 $x-y$ 方向的变化幅度更大，这是因为受到了 z 方向磁场的约束。

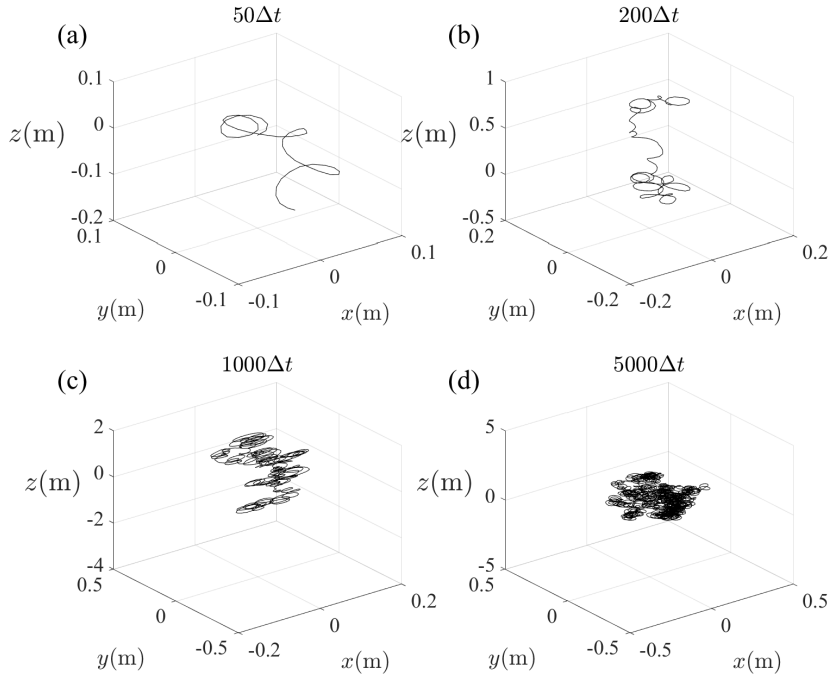


图 4.9 三维位置空间中，采用 ISSDE 模拟程序得到不同时刻单个带电粒子在磁化等离子体中的随机演化行为。

为了得到粒子系在速度空间的演化，采用 ISSDE 模拟程序 10000 粒子的演化行为，取时间步长为 $\Delta t = 0.1\tau_{ei}$ ，其它参数如表4.1。所得粒子系在速度空间的演化如图4.11。与非磁化等离子体中带电粒子系在速度空间的演化不同，在磁化等离子体中，粒子系初始时段在速度空间的演化是在球面上的振荡，即粒子系分布函数发生周期性的变化，如图 (a),(b) 所示，粒子系在速度空间的质心位置不断地发生变化。随着系统演化的不断进行，粒子系在速度空间的部分最终也趋于均匀分布。

粒子系在 $x-y$ 速度空间和 $y-z$ 速度空间分布函数的演化如图4.12和图4.13。在 $x-y$ 速度空间，带电粒子在初始时段因为磁场的影响使 x 方向的动量向 y 方向转移，因此在 y 方向速度的分布函数的展宽逐渐变大，同时，在 x 方向速度

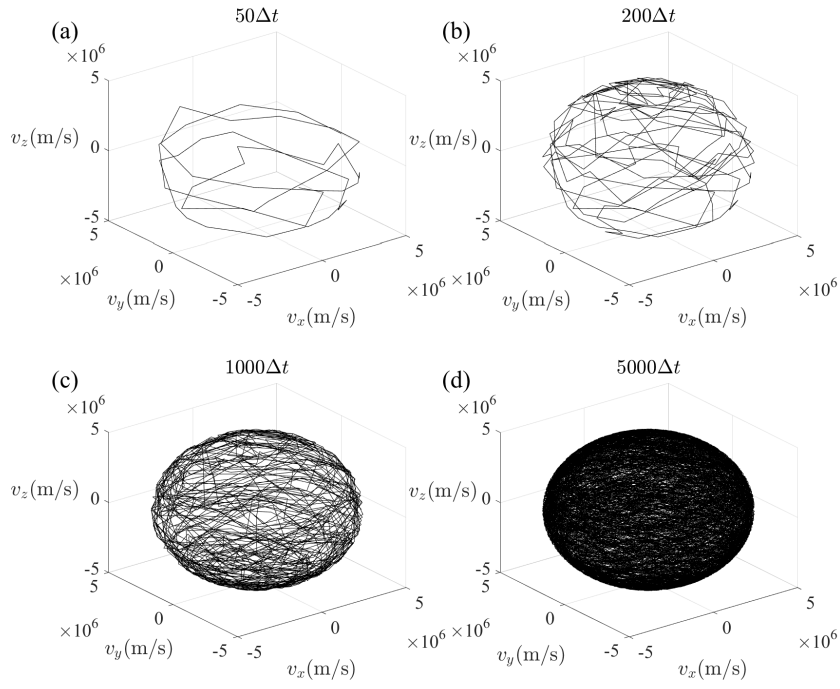


图 4.10 三维速度空间中，采用 ISSDE 模拟程序得到不同时刻单个带电粒子在磁化等离子体中的随机演化行为。

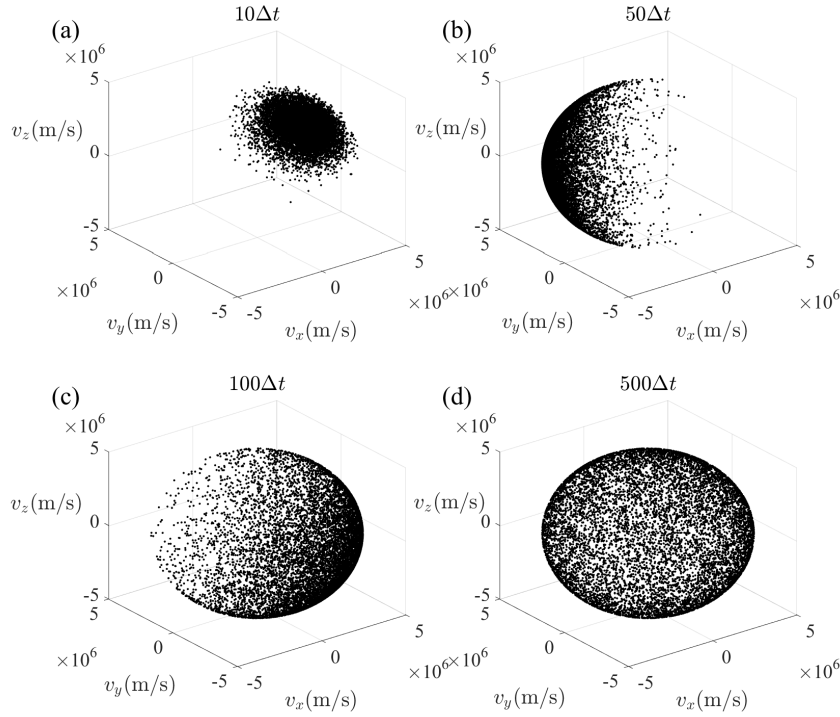


图 4.11 ISSDE 模拟程序对粒子系综在速度空间演化的模拟。粒子系初始时刻的演化为在一个半径为 5×10^6 m/s 的球面上振荡的模式。

分布函数在总面积减小的同时展宽也逐渐变大,如图(a),(b)所示。分布函数在 $x-y$ 方向不断地发生周期性的变化,在图中表现为沿着球面的旋转,同时也逐渐趋于均匀,如图(c),(d)所示。在 $y-z$ 速度空间,粒子系在 z 方向的速度分布函数是关于 0 m/s 对称的,随着粒子系不断的演化, z 方向分布函数的展宽逐渐增大。而在 y 方向,由于磁场的作用,将 x 方向的动量转移到 y 方向,因此 y 方向的分布函数的展宽也逐渐增大,但由于受到的磁场力不是各向同性的,因此粒子系速度分布函数在 y 方向也是各向异性的。初始时段粒子系速度分布函数周期性的变化,如图4.13中的(a),(b),(c)所示。

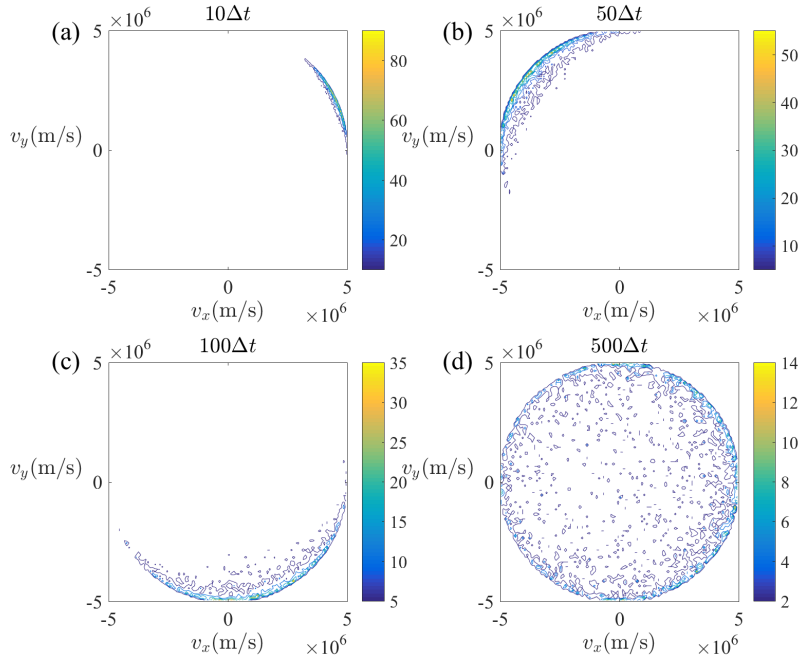


图 4.12 磁化等离子体中粒子系速度在 $x-y$ 速度空间分布函数演化的 contour 图。

对整个入射粒子系综做统计平均,得到入射粒子系综平行入射方向平均速度,磁化等离子体中 FP 方程结果与 ISSDE 结果对比如图4.14。两者结果符合得很好。在磁场的作用下,粒子系平行方向的平均速度大小周期性的变化,但总体变化趋势和没有磁场的情况是一样的。因为磁场不改变粒子的总动能,而是将动能在垂直与磁场的方向上进行转移,因此在垂直磁场的两个方向上, x 方向和 y 方向,粒子系的平均速度大小会发生周期性的变化。与此同时,垂直于磁场方向总体的平均速度是减小的,这是因为粒子间的碰撞在速度空间是各向同性的,因此粒子速度在相空间逐渐趋于各向同性的分布。做系综平均时,各个方向速度大小相互抵消。当沿 z 方向外加磁场下,采用 ISSDE 模拟得到入射粒子系在粒子入射方向系综平均速度的大小变化和 FP 方程所得的结果在开始阶段十分的相似。在经过大约 80 个碰撞时间后,粒子系的平均速度开始趋于平衡,采用 ISSDE 所得粒子系平均速度和 FP 方程所描述的粒子系平均速度就有所不同,采

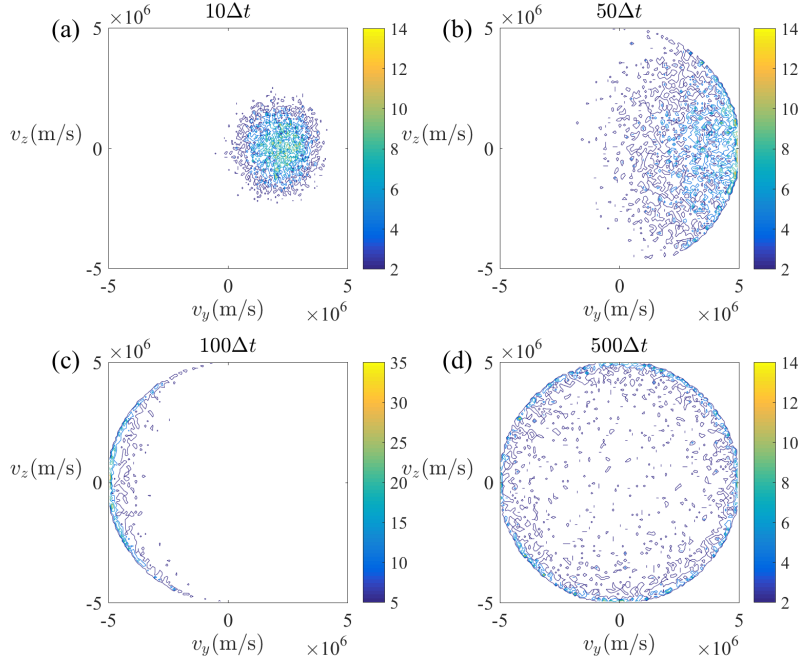


图 4.13 磁化等离子体中粒子系速度在 y - z 速度空间分布函数演化的 contour 图。

用 ISSDE 所描述的结果显示入射粒子系减速至一定程度后其速度会在平衡位置附近上下摆动，而采用 FP 方程所描述的粒子系平均速度的变化则不能体现这一点。右图为入射粒子系在 y 方向的速度大小变化^[16]。

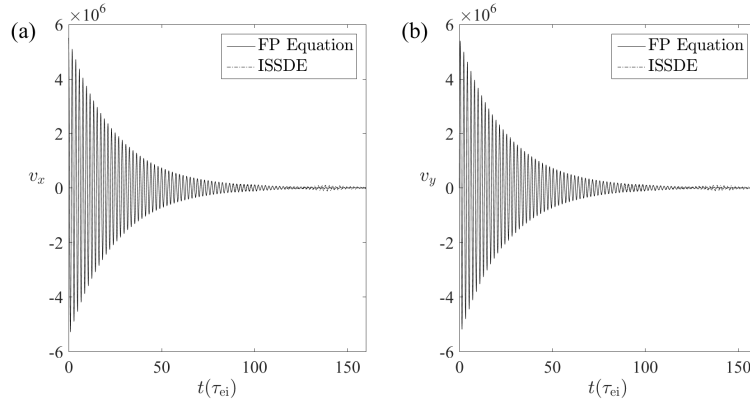


图 4.14 均匀外磁场作用下带电粒子在垂直磁场方向的慢化过程。图 (a) 实线为磁场作用下 FP 方程沿入射方向的慢化过程的解，虚线为磁场作用下 ISSDE 模拟给出沿入射方向慢化过程的解。图 (b) 垂直磁场和入射方向的慢化过程，实线为 FP 方程的解，点线表示 ISSDE 模拟程序给出的解。

对于简化的 Lorentzian 等离子体，随机力值改变速度方向而不改变速度大小，因此其动能是守恒的。我们采用 ISSDE 来计算各个方向动能系综平均的演化。取参数如表 4.2，对于电子-离子碰撞，也可以采用 Maxwellian 等离子体模型，但得到的结果将类似于 Lorentzian 等离子体。在非磁化与磁化等离子体中，采用 ISSDE 得到试探粒子系各个方向动能在 Lorentzian 等离子体和 Maxwellian 等离子体中

的系综平均如图4.15。可以看出，在两种情况下，粒子系总动能都是守恒的，平行入射粒子速度方向和垂直入射粒子速度方向动能最终平衡位置都是一样的。针对这两种情况的计算体现出 ISSDE 对碰撞计算的准确性。利用简化 Lorentzian 等

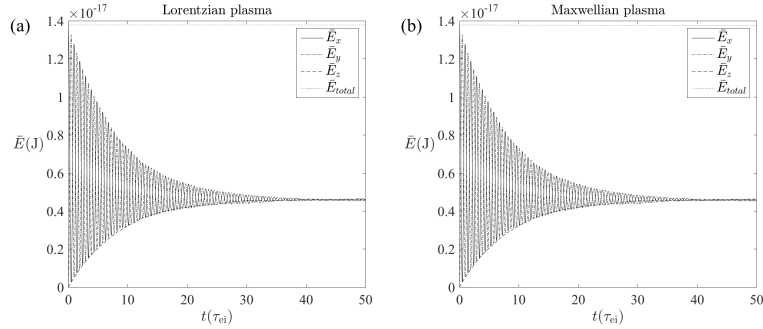


图 4.15 磁化等离子体中试探粒子系各个方向动能的系综平均，图 (a) 背景等离子体为 Lorentzian 等离子体，图 (b) 背景等离子体为 Maxwellian 等离子体

离子体能量守恒的特点，我们采用 2 级随机 Runge-Kutta 方法 R2^[96]，分裂法中随机部分采用 2 级随机 Runge-Kutta 方法以及分裂法中随机部分采用隐式中点格式这三种方式进行计算。然后我们比较相对能量误差。所得结果如图4.16。可以看出当时间步长为 $5 \times 10^{-1} \tau_{ei}$ 时，由全随机 Runge-Kutta 方法计算的数值结果发散了，采用分裂法的结果比全随机 Runge-Kutta 方法更好。而采用分裂法的情况中，随机部分采用隐式中点格式的比采用随机 Runge-Kutta 的好。当 Newton-Raphson 或者拟牛顿法的给定精度为 10^{-13} 时，分裂法中采用隐式中点格式的数值结果的相对误差为 10^{-10} 。因此分裂法随机部分采用隐式中点格式具有一定的优势。对于一维单 Wiener 过程，随机 Runge-Kutta 方法 CL, E1 和 E2 的收敛阶数为 1.5 阶^[96-97]。然而，对于高维多 Wiener 过程，它们的收敛阶数变为 0.5 阶。而隐式中点格式不会有这样的问题，依旧保持 1.0 阶。

4.2 Maxwellian 分布入射电子在 Maxwellian 分布背景电子中的弛豫过程

相比于 Lorentzian 等离子体，在 Maxwellian 等离子体中目标函数和目标函数的导数都更加复杂。Jacobian 矩阵有可能因为不合适的随机数的选取而变得稀疏或者出现奇异。因此，对于 Maxwellian 等离子体，我们采用 Broyden 方法替代 Newton-Raphson 方法来求解非线性方程。作为 benchmark，我们令入射粒子为具有和背景磁化 Maxwellian 电子具有相同速度分布的电子。入射电子的平均速度为 0 m/s，温度为 8 eV。考虑弛豫过程，如果入射电子持续处在平衡状态并保持温度不变，则表明程序是正确的。结果如图4.17，入射电子在各个方向的温度都保持在 8 eV。数值结果和物理结果的一致性表明 ISSDE 程序的正确性。

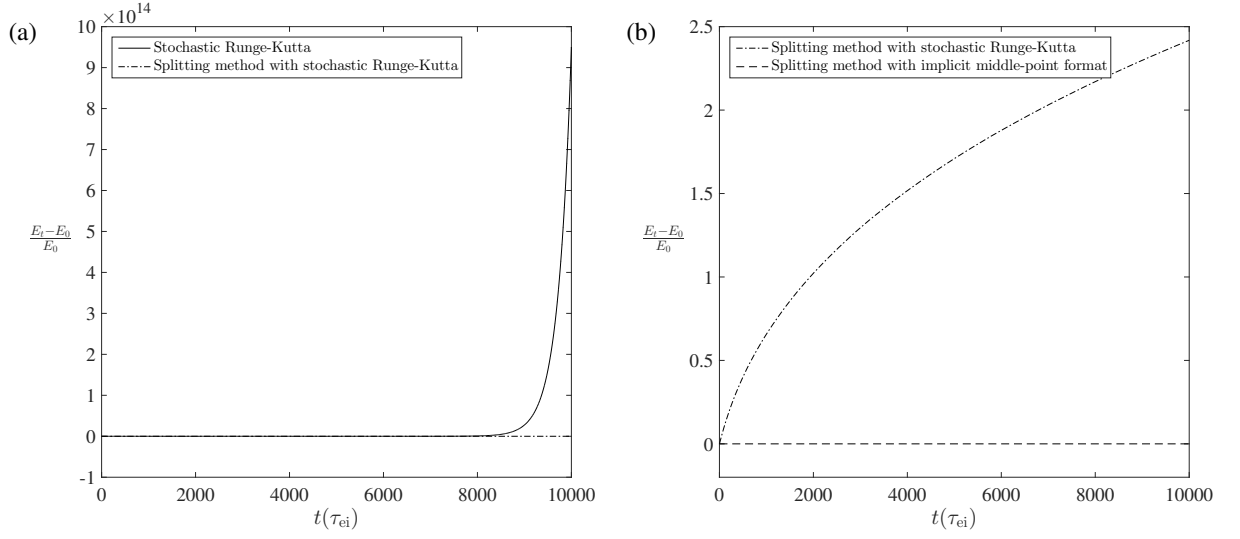


图 4.16 多种方法得到系综平均能量相对误差, (a). 实线表示全随机 Runge-Kutta, 点线表示分裂法随机部分采用随机 Runge-Kutta 方法; (b). 虚线表示分裂法随机部分采用隐式中点格式

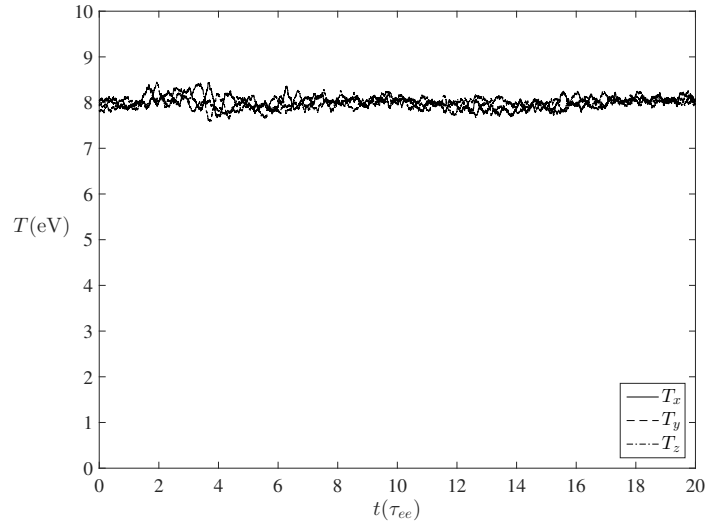


图 4.17 磁化 Maxwellian 电子中服从相同速度分布的电子的温度演化。 τ_{ee} 表示电子-电子碰撞的特征时间。入射电子的初始温度和背景电子温度一样为 8 eV。

4.3 粒子束在 Maxwellian 等离子体中的慢化过程

中性束注入辅助加热是等离子体加热的一种基本方式。入射高能中性束将通过与背景等离子体的碰撞电离和电荷交换变为高能离子束，然后高能离子通过碰撞逐渐热化并将能量传递给背景等离子体，最终和背景等离子体达到平衡。使用 ISSDE 程序，我们能够模拟入射粒子束的慢化过程。也可以计算入射粒子束分布函数的演化以及物理量系综平均。在下面的小节中，我们将模拟当入射粒子为电子和离子时入射粒子在磁化 Maxwellian 等离子体中的慢化过程。对于电子-电子碰撞，离子-离子碰撞，背景电子和离子是不能看成是静止的，因此我们需要使用方程 (2.105) 来考虑背景温度的影响。

4.3.1 电子束在磁化 Maxwellian 等离子体中的慢化过程

在磁化等离子体中，需要考虑外场的影响。参数如下，外加电场强度为 $\mathbf{E} = 0$ V/m，外加磁场沿着 z 方向，磁场强度大小为 $B_0 = 2 \times 10^{-3}$ T。入射电子束的方向垂直于磁场方向。系综平均速度随时间的演化如图4.18所示。在磁场的影响下，入射电子束的动量在垂直于磁场的方向上不断的转换。由于碰撞的影响，系综平均速度逐渐降低，最终降到 0。这意味着入射粒子系综平均动能由于碰撞的影响而传递给背景粒子。入射粒子总能量在不同方向系综平均的演化如图4.19。

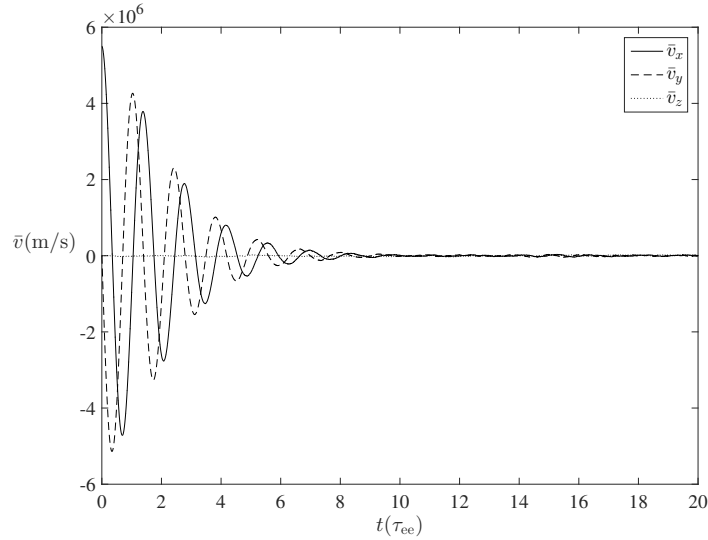


图 4.18 入射电子束在磁化 Maxwellian 电子中三个方向系综平均速度的演化。 τ_{ee} 是电子-电子碰撞的特征时间

因为碰撞的影响，入射粒子总能量系综平均随时间降低，并最终达到一个恒定值。入射电子束总能量因为碰撞而传递给背景电子。入射电子束的平衡可以由入射电子束温度的演化看出，如图4.20。入射电子总能量由入射电子平均动能和内能组成。在慢化过程中，入射粒子平均动能一部分转化为入射粒子内量，一部

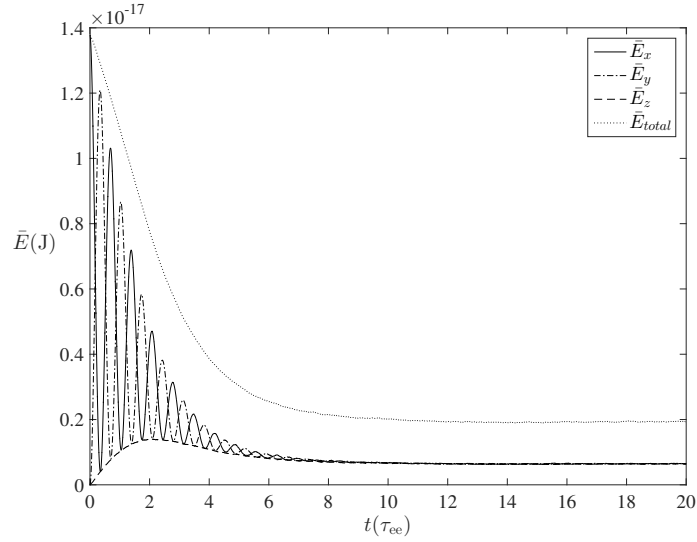


图 4.19 入射电子束在磁化 Maxwellian 电子中三个方向系综平均能量的演化。点线表示总能量系综平均的演化

分传递给背景粒子。当慢化过程不是很剧烈时，入射电子束的平均动能将先转换为入射电子的内能。然后入射电子内能将以热传导的形式将能量传递给背景电子。最终入射电子和背景电子达到热平衡。入射电子分布函数的演化可以更清晰地表明这一过程，如图4.21。

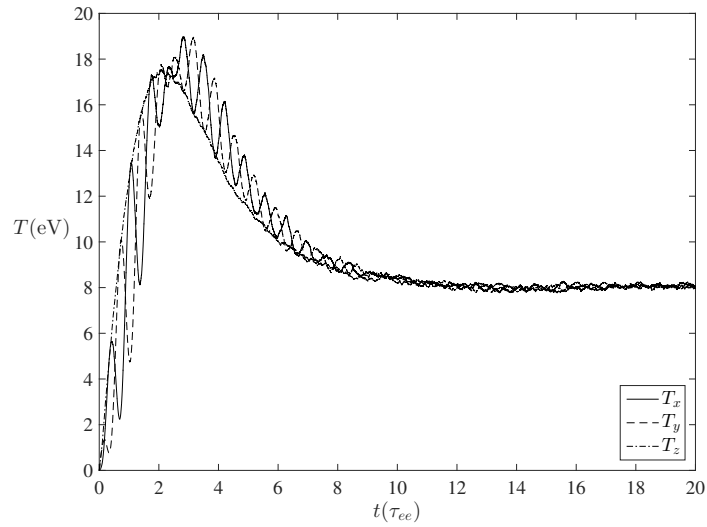


图 4.20 入射电子束在三个方向温度随时间的演化。最终三个方向平衡的温度为 8 eV

在磁场的作用下，入射电子在速度空间旋转。入射电子经历慢化过程和扩散过程。在初始阶段，扩散过程占主导，因此分布函数逐渐在速度空间的展宽逐渐变大。然而，当入射电子系综平均速度不断减小时，慢化过程逐渐占主导因为电子-电子碰撞截面逐渐增大。而当入射电子慢化过程变为主导时，入射电子分布函数逐渐趋于 Maxwellian 分布。当入射粒子温度和背景达到平衡时，入射粒子服从的 Maxwellian 分布对应的标准差和背景温度是一致的。

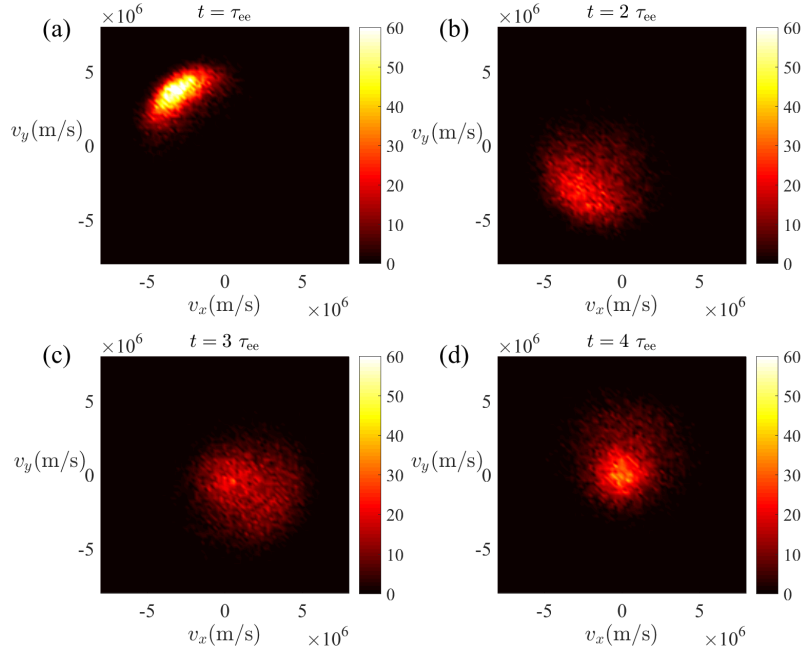


图 4.21 入射电子束在磁化 Maxwellian 等离子体中分布函数在 $x - y$ 速度空间的演化。(a). $t = \tau_{ee}$; (b). $t = 2\tau_{ee}$; (c). $t = 3\tau_{ee}$; (d). $t = 4\tau_{ee}$.

4.3.2 离子束在磁化 Maxwellian 等离子体中的慢化过程

考虑入射粒子为离子的情况，并令入射离子的初始速度为 5.5×10^5 m/s，离子束系综平均速度随时间的演化如图4.22。当入射离子相对速度很小时，离子与电子的碰撞截面很大，因此慢化过程占主导。相比于离子回旋半径，离子-电子碰撞的时间尺度小 250 倍。我们可以看出离子系综平均速度在 1 到 2 个离子回旋周期降到 0。入射离子系综平均能量的演化如图4.23。

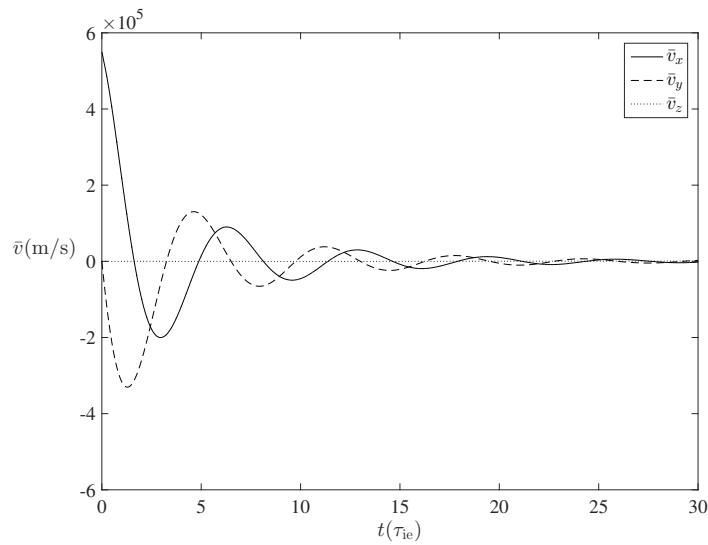


图 4.22 入射离子束在磁化 Maxwellian 电子中三个方向系综平均速度的演化。 $v_x = 5.5 \times 10^5$ m/s, τ_{ie} 为离子-电子碰撞特征时间

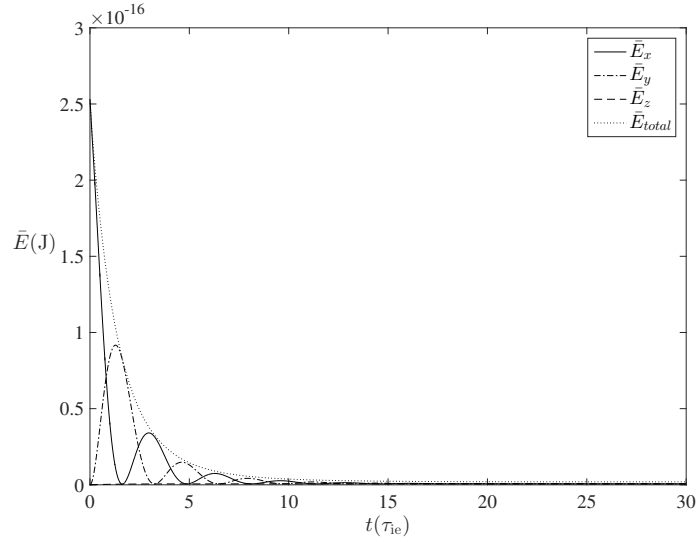


图 4.23 入射离子束在磁化 Maxwellian 电子中系综平均能量在三个方向随时间的演化。点线表示总能量系综平均的演化

类似于电子-电子碰撞, 离子束总能量通过碰撞传递给背景电子, 最终入射离子和背景电子达到平衡。相比于电子-电子碰撞过程, 离子-电子碰撞过程中, 入射离子的扩散过程相比于慢化过程不占主导, 这是因为在离子-电子碰撞过程中, 大部分发生的都是小角散射。因此在离子-电子碰撞过程中, 当慢化过程占主导时动量交换和能量交换发生得很快。这个可以从入射离子温度随时间的演化看出, 如图4.24。离子和电子之间迅速的动量和能量交换使入射离子大部分的平均动能传递给背景电子, 而小部分平均动能转换为入射离子的内能。入射离子最终温度与背景电子温度一样。

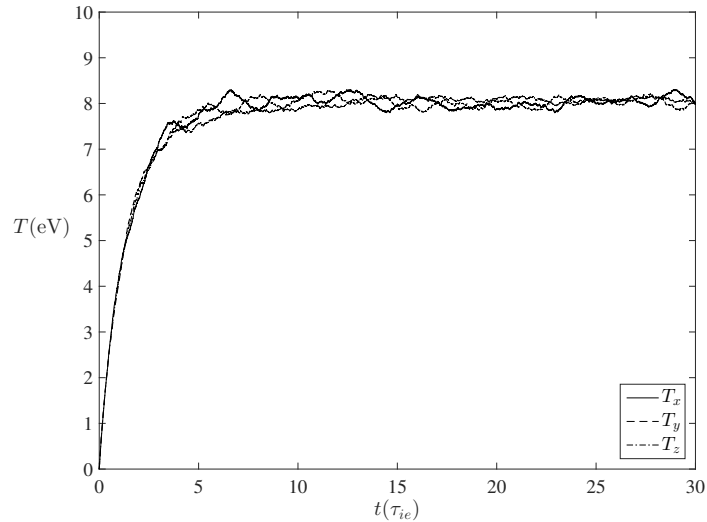


图 4.24 入射离子束在磁化 Maxwellian 电子中三个方向温度的演化。最终三个方向的温度接近 8 eV

入射离子分布函数的演化如图4.25所示。由于慢化过程入射离子速度在 $x-y$

方向逐渐降为 0。分布函数的形状可以反映出碰撞的扩散过程。离子-电子扩散过程并没有电子-电子碰撞过程剧烈是因为碰撞过程中大部分都是小角散射。

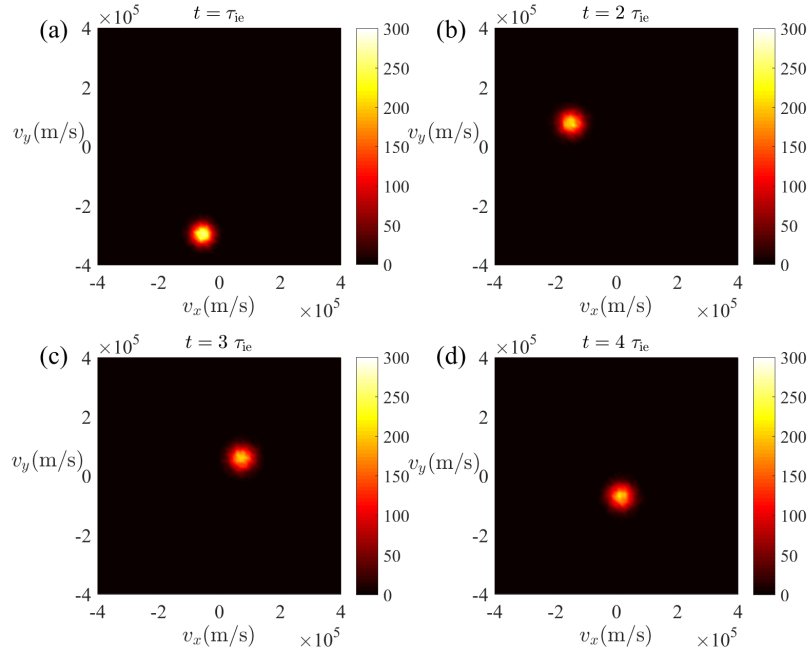


图 4.25 入射离子束在磁化 Maxwellian 等离子体中分布函数在 $x-y$ 速度空间的演化。(a). $t = \tau_{ie}$; (b). $t = 2\tau_{ie}$; (c). $t = 3\tau_{ie}$; (d). $t = 4\tau_{ie}$.

4.4 本章小结

在本章中，我们首先采用 ISSDE 计算了非磁化磁化情况下简化的 Lorentzian 等离子体中入射电子束的慢化过程，我们不仅可以得到单个粒子的轨迹，入射粒子系统的轨迹，还能对粒子分布函数随时间的演化。不仅如此，通过对入射粒子系统系综平均量的统计，并将所得结果与 FP 方程的解析数值解进行对比，其结果的一致性表明了 ISSDE 隐式模拟程序的准确性。ISSDE 对磁化情况的处理反映出 ISSDE 可以计算对于外场更加复杂的情况。在由简化的 Lorentzian 等离子体中入射粒子动能守恒出发，我们比较了分裂法下隐式中点格式与全随机 Runge-Kutta 方法的长期稳定性，由此表明 ISSDE 在数值误差控制方面的优良特性。

作为 benchmark，我们采用 ISSDE 计算了 Maxwellian 电子在同分布的 Maxwellian 电子中的弛豫过程，计算结果和物理过程是一致的，我们研究的电子对应的温度一直和背景等离子体温度保持一致。最后我们采用 ISSDE 对电子束入射 Maxwellian 电子以及离子束入射 Maxwellian 电子慢化过程，由此体现了 ISSDE 的适用性。离子入射 Maxwellian 电子与电子入射 Maxwellian 电子速度空

间的扩散过程显示出截然不同的特性, 这些特性和物理是保持一致的。采用统计的手段得到各个物理量系综平均随时间的变化, 并得到粒子体系分布函数随时间的演化。

第5章 托卡马克中的快离子损失与慢化

在聚变装置如 EAST 中, 由中性束沉积产生的快离子和聚变产生的 α 粒子能量很高, 对高能离子的约束是聚变研究中重要的物理问题。中性束注入等离子体后通过碰撞发生电离或者与背景等离子体发生电荷交换, 然后沉积为快离子。快离子通过动量交换和能量交换将能量传递给背景等离子体。然而因为 EAST 磁场的弯曲与不均匀性, 快离子将发生曲率漂移和梯度漂移, 发生横跨磁力线的动力学行为。在非对称磁场和 3D 扰动的影响下, 有的快离子挣脱磁场的束缚, 变成损失粒子, 这些损失粒子将会撞击在装置器壁上, 对装置造成破坏, 引起不稳定性使等离子体熄灭等。因此对快离子损失的研究也十分的重要。采用 ISSDE 全轨道粒子追踪程序, 我们可以计算在库仑碰撞影响下, 快离子的损失与慢化与哪些因素有关。ISSDE 是基于 Startonovich SDE 的隐式中点法, 采用分裂法和拟牛顿法开发的含库仑碰撞全轨道并行模拟程序。在计算 EAST 上快离子损失过程中, 我们已经在程序中设置了 EFIT 和 NUBEAM 的程序接口, 用于设置平衡位型参数与初始快离子分布。在模拟计算中, 采用 EFIT 得到 EAST 初始时刻的平衡位型, 采用 NUBEAM 计算中性束的沉积, 得到初始时刻快离子的分布, 然后将平衡位型的等离子体参数和快离子初始时刻分布作为输入参数采用 ISSDE 追踪快离子的轨迹, 得到快离子损失与慢化的信息。

5.1 平衡位型与初始分布

在我们的模拟中, 我们用 EFIT 得到初始时刻 EAST 的平衡位型, 在柱坐标下, EAST 磁场强度 $\mathbf{B}$ 表达式与磁面函数 ψ 的关系为

$$B_R = \frac{1}{R} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad B_z = -\frac{1}{R} \frac{\partial \psi}{\partial R}, \quad B_\phi = \frac{g(\psi)}{R}, \quad (5.1)$$

其中 ψ 为磁面函数, $g(\psi)$ 为极向电流函数, 对于给定的 ψ 和 $g(\psi)$, 我们可以通过 (5.1) 计算磁场的各个分量值。Experimental Advanced Superconducting Tokamak (EAST) 是一个全超导托卡马克, 第一次放电成功在 2006 年。EAST 的主要参数如下: 大半径为 1.75 m, 小半径为 0.4 m, 拉长比为 1.6–2, 三角度为 0.5–0.7, 环向磁场强度为 1.6–2.3 T。同时, 典型物理参数为: 平均电子密度为 $1-5 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$, 中心电子和离子温度分别为 2–4 keV 和 1–2 keV^[33,98]。将装置参数和测量到的等离子体参数输入到 EFIT 中进行平衡的重构, EFIT 通过求解 GS 方程来重构 2D 托卡马克平衡, 同时近似保持实验测量。平衡重构对托卡马克数据分析和重建是很重要的。平衡重构可以提供对等离子体操作和实验数据解释必要的等离子体形状和储能信息, 可以提供输运和稳定性研究所必需的磁场位型和电流, 压

力分布^[99-100]。

根据 EFIT, 我们得到 #93910 炮磁面函数如图 5.1。对应的磁场位型为双零位型, 磁轴位置为 (1.9721, 0.043), 红色线表示最外层磁面 (LCFS), 黑色虚线表示第一壁 (FW) 的位置。

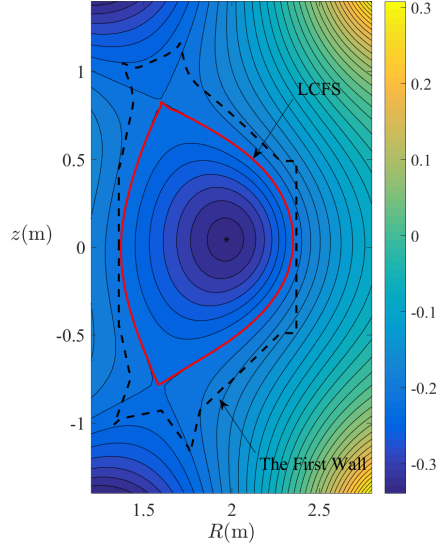


图 5.1 EAST 放电 #93910 磁面函数

根据方程 (5.1) 我们可以计算对应的磁场强度分布如图 5.2。环向磁场如图 5.2-(a), 环向磁场 B_ϕ 沿着大环半径方向是不断减小的, 即环向磁场在大环半径方向存在向内的梯度。极向磁场 B_θ 分布如图 5.2-(b), 在最外层磁面内, 极向磁场是顺时针旋转的。由于磁场的梯度和弯曲, 使快离子产生梯度漂移和曲率漂移, 因此产生横越磁力线的运动。

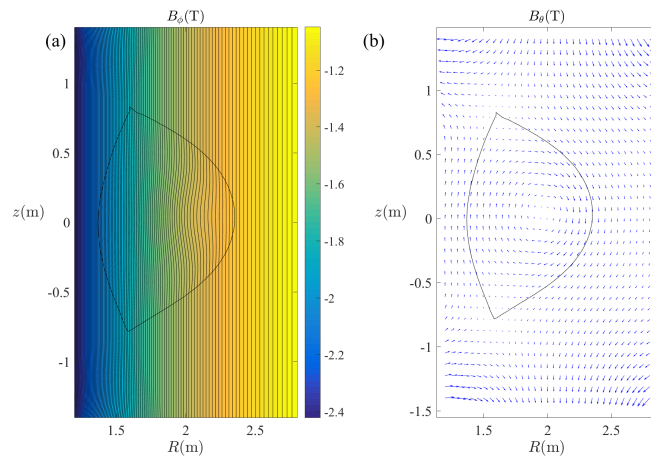


图 5.2 EAST 放电 #93910 炮磁场强度分量 B_ϕ 与 B_θ

根据坐标转换，我们可以得到直角坐标系下磁场强度 $\mathbf{B}$ 的表达式为

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \frac{1}{R} \frac{\partial \psi}{\partial z} \left(\frac{x}{R} \mathbf{e}_x + \frac{y}{R} \mathbf{e}_y \right) - \frac{1}{R} \frac{\partial \psi}{\partial R} \mathbf{e}_z + \frac{g}{R} \left(-\frac{y}{R} \mathbf{e}_x + \frac{x}{R} \mathbf{e}_y \right) \\ &= \left(\frac{x}{R^2} \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{gy}{R^2} \right) \mathbf{e}_x + \left(\frac{y}{R^2} \frac{\partial \psi}{\partial z} + \frac{gx}{R^2} \right) \mathbf{e}_y - \frac{1}{R} \frac{\partial \psi}{\partial R} \mathbf{e}_z,\end{aligned}\quad (5.2)$$

根据方程 (5.2)，我们便可以在直角坐标系中计算托卡马克中任意一点磁场强度大小，然后带入方程 (2.105) 便能计算粒子轨迹。

中性束注入等离子体后通过与背景电子离子碰撞电离和电荷交换的方式变为快离子，在等离子体中沉积。EAST 上的 NBI 系统用两个氘束线，其功率为 2–4 MW，束能量为 50–80 keV。NUBEAM 是 PPPL 用于托卡马克快离子沉积演化，慢化以及热化的 Monte-Carlo 包^[33]。NUBEAM 既可以计算中性束注入后沉积的快离子分布，也可以计算由聚变反应产生的快离子分布^[101]。采用 NUBEAM 我们可以得到快离子的初始分布，其分布如图 5.3-5.5。A 窗口对应的两个束线的切向半径分别为 1.264 m 和 0.731 m。图 5.3-(a) 为快离子初始位置的俯视图，图 5.3-(b) 为快离子初始位置在极向面的投影，红色线表示最外层磁面。NBI 快离子包含总能量为 E_1 的粒子部分，能量为 $E_2 = 1/2 E_1$ 的粒子部分，以及能量为 $E_3 = 1/3 E_1$ 的粒子部分。在初始时刻，切向束的总能量为 $E_1 = 65.224$ keV。而每个部分的比例为 69.54%, 23.14% 和 7.32%。在初始时刻，垂直束的总能量为 $E_1 = 65.644$ keV，各部分的比例分别为 65.55%, 12.58% 和 21.87%。快离子平行方向速度在 R 方向的分布如图 5.4。图 5.5 为初始时刻快离子投掷角的分布，对于垂直入射的情况，投掷角靠近 90° 的比例更大一些，因此对于垂直入射情况，其香蕉轨道粒子份额更大。

5.2 对碰撞的处理

在得到托卡马克平衡磁场分布与快离子初始时刻位置分布和速度分布后，我们可以通过 ISSDE 追踪每一个快离子的轨迹。因为碰撞参数是背景粒子密度和温度的函数，因此需要得到粒子当地位置的背景密度和温度值，然后带入求解对应的碰撞系数。背景电子密度和温度如图 5.6-5.7 所示。采用插值的方法便可以得到快离子当地位置背景密度和温度值。在计算过程中，采用的等离子体剖面 and 温度剖面是 4.52 s 的，并且这里假设背景等离子体密度剖面 and 温度剖面在计算过程中不随时间变化。我们假设背景离子的温度和密度与背景电子具有相同的剖面。对于在 LCFS 之外的背景等离子体温度和密度，我们在模拟中使用 LCFS 处对应的值。

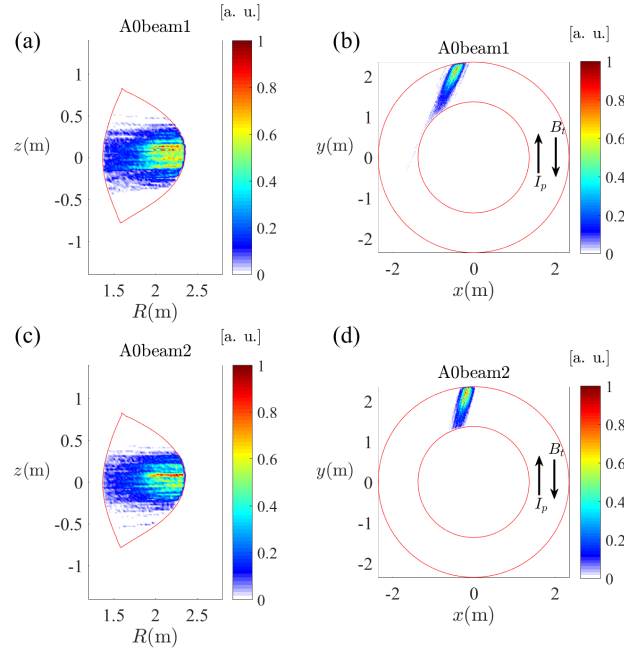


图 5.3 NUBEAM 所得快离子初始位置分布。(a),(b) 为切向束注入, (c),(d) 为垂直束注入。

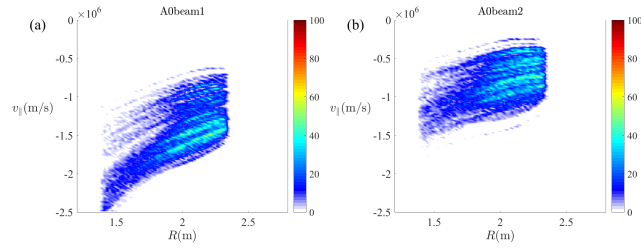


图 5.4 NUBEAM 所得快离子平行方向速度分布。(a) 为切向束注入, (b) 为垂直束注入。

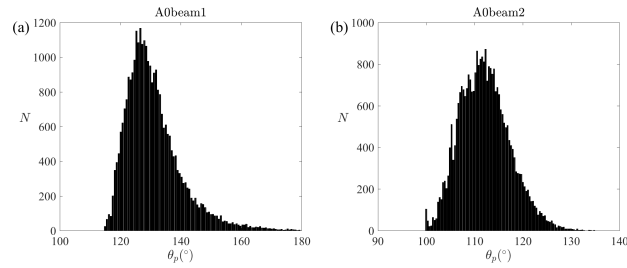


图 5.5 NUBEAM 所得快离子投掷角分布。(a) 为切向束注入, (b) 为垂直束注入。

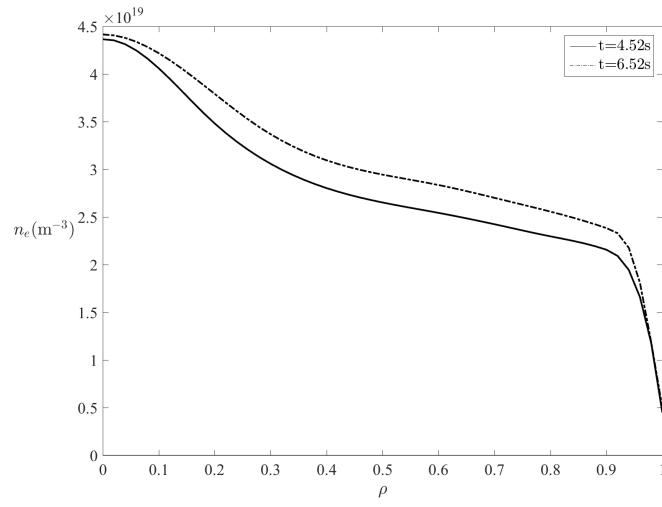


图 5.6 EAST 放电 #93910 电子密度分布剖面

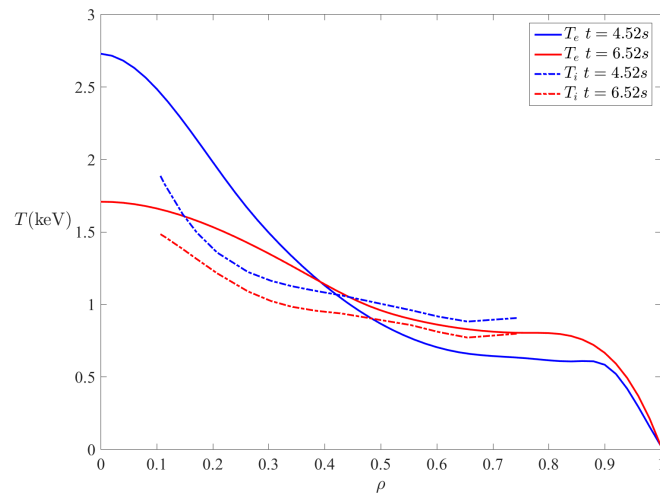


图 5.7 EAST 放电 #93910 离子温度分布剖面

5.3 快离子损失与慢化

NBI 快离子通过动量交换和能量交换向背景等离子体转移能量。由于磁场的弯曲和不均匀性,快离子将经历曲率漂移和梯度漂移,横跨磁力线运动。一些快离子最终会撞到 FW 上并损失。利用 Monte-carlo 全轨道并行追踪程序 ISSDE,结合位置空间和 $P_{\parallel} - A$ 空间的快离子信息,我们可以计算出边界为 LCFS 和 FW 时快离子的直接损失和轨道类型。下面我们将介绍库仑碰撞作用下的投掷角散射损失、随机扩散损失和慢化过程。

5.3.1 边界为 LCFS 和 FW 的直接损失

我们来计算边界为 LCFS 和 FW 时快离子的直接损失^[102]。根据对平衡参数与快离子初始位置分布和速度的设置,我们采用 ISSDE 进行计算,对粒子信息进行统计。数值实验参数如表5.1,其中 $T_{ic} = 4.07385 \times 10^{-8}$ s 为磁轴磁场强度为 -1.61 T 时快离子的回旋周期。

表 5.1 快离子在等离子体中慢化行为的参数

变量	参数	数值
Δt	时间步长 (s)	$\frac{1}{20\pi} T_{ic}$
$\mathbf{E}$	初始电场强度 (V/m)	(0, 0, 0)
T	总时间步数	5×10^5
N	总粒子数	29952
M	总线程数	32
B_0	磁轴处磁场强度大小 (T)	-1.61

我们得到快离子损失位置分布以及损失粒子初始时刻位置如图5.8-5.9。损失粒子的位置都在中平面以下,这与环向磁场的方向有关。当环向磁场为顺时针方向时,环向磁场梯度方向指向环形中心,所以弱场侧的快离子的受力方向是由强场侧到弱场侧,所以相应的梯度漂移是向下的。曲率方向是沿主要径向向外,所以快离子的离心力是向外的。因此,相应的曲率漂移方向也是向下的。因此,快离子的损失位置将在中平面以下。损失离子的初始位置是在弱场一侧。红色点是损失边界为 LCFS 时的离子损失位置,蓝色点是损失边界为 FW 时的离子损失位置。从图5.8和图5.9的 (a) 和 (b) 可以看出,快离子在 FW 的损失位置是在中平面附近和偏滤器附近。由于快离子的回旋半径很大,一些已经漂出 LCFS 的离子会漂回 LCFS 并再次被磁场俘获。图5.8和图5.9的对比图显示,垂直束的快离子的损失位置包括高场侧偏滤器、中平面和低场侧中平面。而切向束的损失位置包括高场侧偏滤器和低场侧中平面。从 (c)-(d) 中我们可以看到,对于同向束,损失快

离子的初始位置在高场侧附近。这些结果证实了 Xu^[62] 等人之前工作的结论。

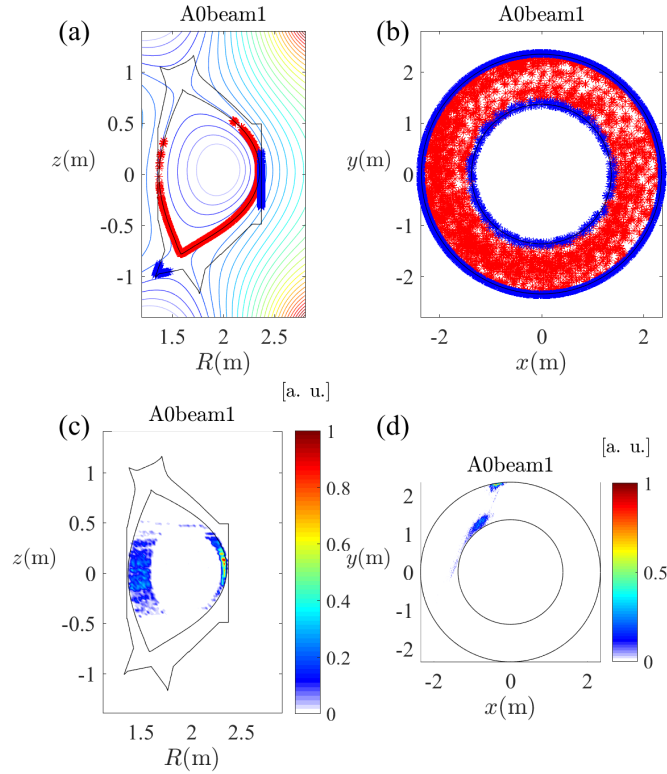


图 5.8 切向束的快离子损失位置，(a)-(b) 为损失粒子损失时刻位置，(c)-(d) 为损失粒子初始时刻位置，红色表示损失边界为 LCFS，蓝色表示损失边界为 FW。

有无碰撞下快离子损失比例如表5.2。由于电流是逆时针的，因此 A0beam1 和 A0beam2 都为同向束，A0beam1 为切向束，A0beam2 为垂直束，我们可以看出，垂直束的损失比切向束的损失要大。含碰撞情况比无碰撞的损失要大。由碰撞引起的损失的比例大于由碰撞引起的非损失的比例，即在碰撞的作用下，快离子的行为更加趋向于损失。比较粒子的初始轨道损失和直接损失，可以看出，对于切向束，有 4.52% 的粒子出了 LCFS 后没有损失，而是重新被回到 LCFS 内。而对于垂直束，这一比例达到了 5.11%。因此，特别是对于垂直束，采用 FW 边界的直接损失的计算结果更加符合真实物理。比较碰撞对直接损失的影响，相比于切向束，垂直束由碰撞引起的损失更大，由碰撞引起的非损失更小，意味着碰撞使垂直束趋于损失的比例更大。碰撞引起的非损失是指在碰撞作用下，在没有碰撞时会损失的粒子没有损失。

在 $8000 T_{ic}$ 时，垂直注入的总损失大于切向注入，直接损失随的时间演变如图5.10所示。除了表5.2中给出的与损失比例有关的数据信息外，在图5.10(a),(b)中，我们还可以得到快速离子损失速率的信息，具体如下。首先，在前 $1000 T_{ic}$ ，快离子的损失速率明显高于平均水平，因为几乎所有的香蕉粒子都能在前 $1000 T_{ic}$

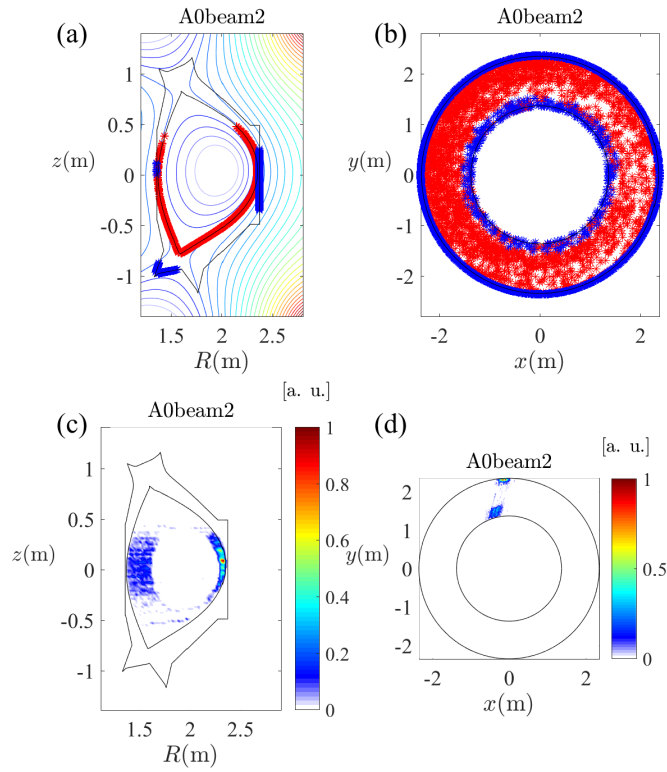


图 5.9 垂直束的快离子损失位置，(a)-(b) 为损失粒子损失时刻位置，(c)-(d) 为损失粒子初始时刻位置，红色表示损失边界为 LCFS，蓝色表示损失边界为 FW。

表 5.2 在 $8000 T_{ic}$ 时有无碰撞是快离子损失比例

入射中性束	A0beam1 (LCFS)	A0beam2 (LCFS)	A0beam1 (FW)	A0beam2 (FW)
损失比例 (无)	0.1455	0.1622	0.1021	0.1184
损失比例 (含)	0.1505	0.1786	0.1053	0.1275
碰撞引起的 损失份额	0.0052	0.0165	0.0035	0.0095
碰撞引起的 非损失份额	0.0002	0.00007	0.00026	0.00036

完成一次回弹。在没有库仑碰撞或波场干扰的情况下，其余粒子可以被很好地约束住，从 5.10(a) 中可以看出。其次，LCFS 边界条件的损失速率比 FW 的大，因为 SOL 中的粒子损失也需要一定的时间。

垂直束的快离子损失率大于切向束的快离子损失率，这与快离子的轨道类型和这些不同轨道类型的粒子的比例有关。除了快离子的空间信息，快离子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的分布也是了解粒子轨道类型的必要视角，如图 5.11-5.14。这里， P_ζ 是粒子的正则角动量， $\Lambda = \mu B_0/E$ ， μ 和 E 是粒子的磁矩和能量， B_0 是磁轴处的磁场强度。在全轨道模拟中这些参数可以采用如下等式得到

$$\begin{cases} E &= \frac{1}{2}mv^2, \\ P_\zeta &= mRv_\parallel - q\psi_p, \\ \mu &= \frac{mv_\perp^2}{2B}. \end{cases} \quad (5.3)$$

这里 v 是粒子的速度， $v_\parallel$ 和 $v_\perp$ 是粒子速度的平行和垂直分量， ψ_p ， B 是粒子位置上的极向磁通和磁场强度。通过快离子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的初始分布，我们可以得到关于粒子轨道类型的更多信息^[103]，如图 5.11 所示。对于固定能量的情况下，根据粒子在磁轴上的 $P_\zeta - \Lambda$ 值（虚线）， $P_\zeta - \Lambda$ 空间被划分为不同粒子轨道类型的区域，具体如下。1) LCFS 的最大磁场强度（黑色长虚线），2) LCFS 的最小磁场强度（黑色实线），3) 捕获-通行轨道边界（基于 $v_\perp = 0$ 的条件，黑色短虚线），4) 和固定 μ 值下的最大 P_ζ 值（上部黑色实线）。从图 5.11 中，我们可以看到，无论是切向束还是垂直束，通行离子的比例都大于香蕉离子的比例。在垂直束中，俘获约束离子的比例要比切向束中的大。在垂直束中，同向俘获离子的比例小于切向束中的比例。同向通行轨道是切向束和垂直束中损失粒子的主要轨道类型。此外，垂直束中损失香蕉离子的比例比切向束中的大。

通过用 ISSDE 跟踪粒子到 $8000 T_{ic}$ ，我们得到了初始时刻所有能量为 E_1 ， E_2 和 E_3 的粒子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的分布，如图 5.12 所示。实际的粒子损失的位置与 $P_\zeta - \Lambda$ 空间中的标记区域相同，这验证了计算的正确性。我们用蓝色，和红色的圆圈来标记 $P_\zeta - \Lambda$ 空间中由库仑碰撞引起的损失位置。对于切向束，通行粒子的比例较高，而对于垂直束，俘获粒子的比例较高。不同轨道粒子的损失位置和比例在位置空间的分布中如图 5.13 和 5.14 中。这里，蓝色的“+”代表损失的香蕉粒子，而红色的“*”代表损失的通行粒子。灰色区域 P1、P2、P3 和 P4 是损失区域。切向束和垂直束中的通行离子在高场侧的偏滤器位置和低场侧的中平面处损失，而俘获离子则在低场侧的中平面处损失。在 $t = 900 T_{ic}$ 时，对于切向束，主要的损失粒子是通行粒子，P4 的损失率占总损失的 84.52%。对于垂直束，0.37% 的通行粒子损失在高场侧的中间平面，即 P1 处，俘获粒子的损失率为 20.58%，这

比切向束中的俘获粒子损失率高。

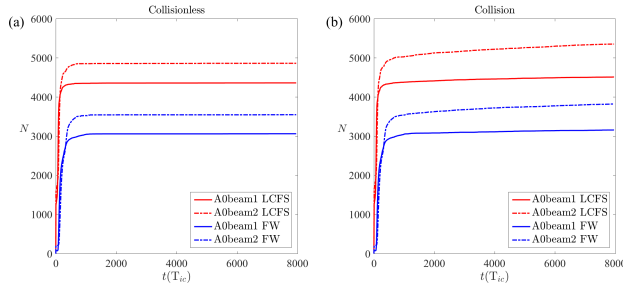


图 5.10 边界为 LCFS 和 FW 时切向束和垂直束快离子损失随时间的变化。(a) 无碰撞情况，(b) 含碰撞情况。实线表示切向束，虚线表示垂直束。蓝线表示边界为 FW 的情况，红线表示边界为 LCFS 的情况。

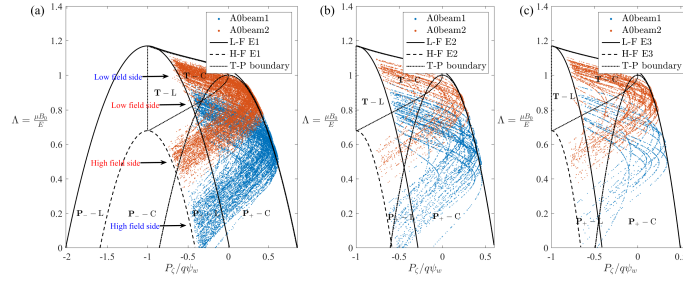


图 5.11 图5.3中不同能量成分的束离子在 $P_{\zeta} - \Lambda$ 空间分布。(a) E_1 , (b) E_2 和 (c) E_3 . 这里, $\Lambda = mB_0/E$, B_0 是磁轴处的磁场强度, E 是粒子能量, 环形动量 P_{ζ} 由 $q\psi_w$ 归一化, ψ_w 是 LCFS 处的极向磁通。黑色实线表示高场侧的边界与固定能量相对应的 LCFS 的边界。而黑色的长短线表示 LCFS 的低场侧的边界。粒子在 $P_{\zeta} - \Lambda$ 空间的不同区域有不同的轨道类型, $P_{-} - L$ 代表反向通行损失区域, $P_{-} - C$ 代表反向通行约束区域。 $P_{+} - L$ 代表同向通行损失区域, $P_{+} - C$ 代表同向通行约束趋于。蓝色和红色的点对应于图5.3中的切向束和垂直束离子。

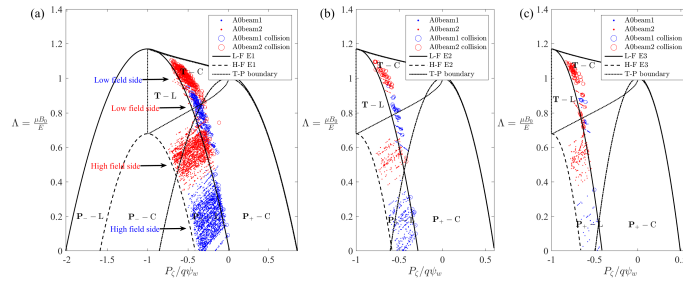


图 5.12 所有损失离子和由碰撞引起的损失离子初始时刻在 $P_{\zeta} - \Lambda$ 空间的分布。红点和蓝点表示切向束和垂直束的所有损失离子的初始位置, 红圈和蓝圈表示切向束和垂直束由库仑碰撞引起的损失离子的初始位置

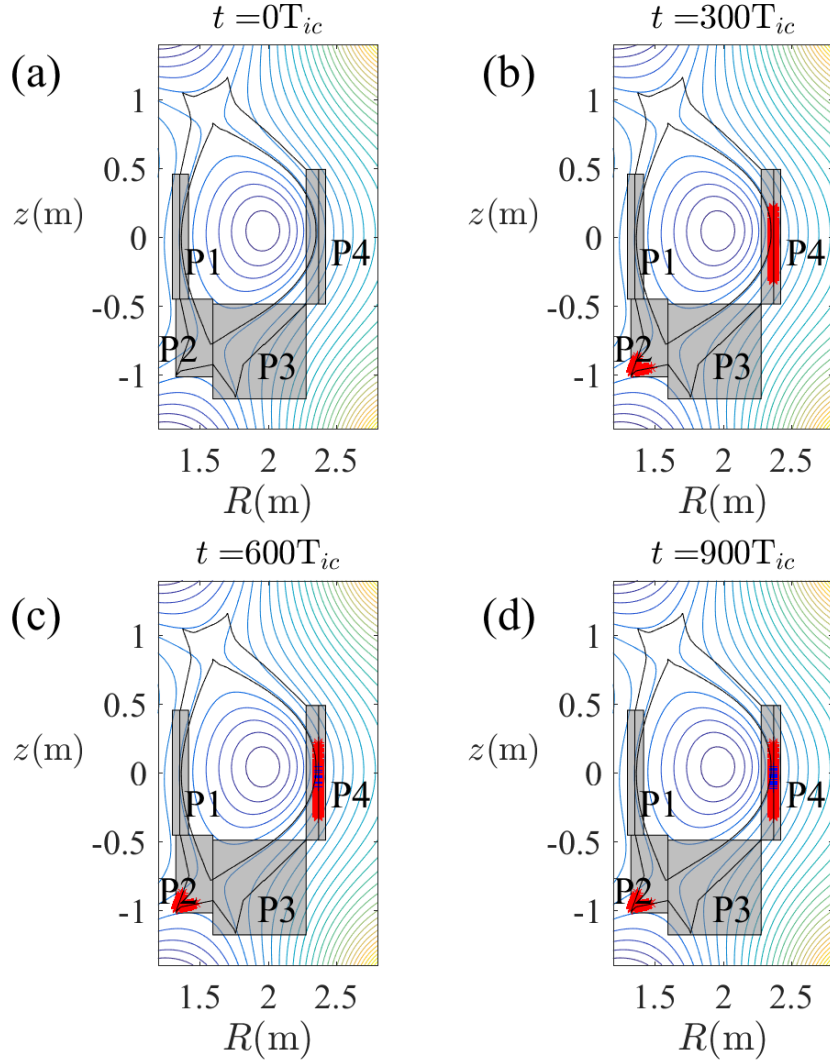


图 5.13 在切向束的情况下，不同时间内灰色区域 P1,P2,P3 和 P4 位置上损失通行粒子和香蕉粒子的比例。红色“*”代表损失的通行粒子，蓝色“+”代表损失的香蕉粒子。在 $900 T_{ic}$ 时，P1,P2,P3 和 P4 的损失通行粒子比例分别为 0%,14.25%,0% 和 84.52%，而 P1,P2,P3 和 P4 的损失香蕉粒子比例分别为 0%,0%,0% 和 1.22%。

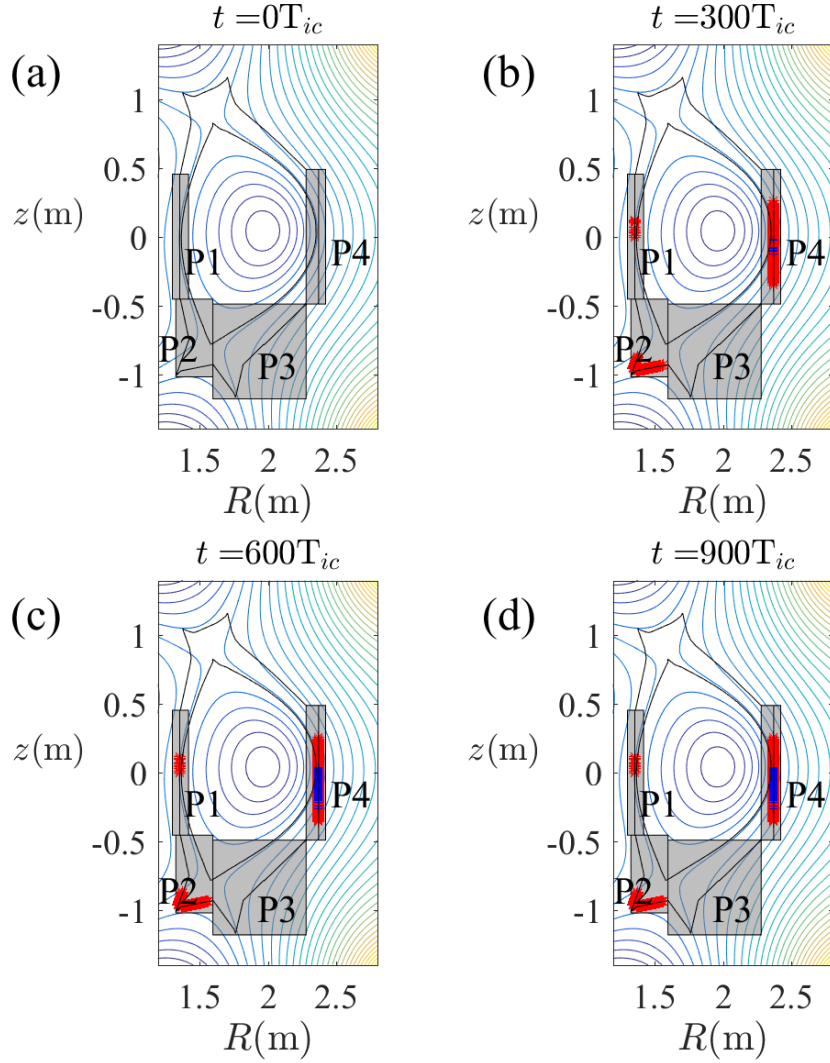


图 5.14 在垂直束的情况下, 不同时间内灰色区域 P1,P2,P3 和 P4 位置上损失通行粒子和香蕉粒子的比例。红色“*”代表损失的通行粒子, 蓝色“+”代表损失的香蕉粒子。在 $900 T_{ic}$ 时, P1,P2,P3 和 P4 的损失通行粒子比例分别为 0.37%,11.79%,0% 和 67.25%, 而 P1,P2,P3 和 P4 的损失香蕉粒子比例分别为 0%,0%,0% 和 20.58%。

5.3.2 由库仑碰撞引起的快离子损失

从上面的分析中，我们可以从快离子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的初始分布看出快离子的直接损失和快离子轨道的类型。为了探索库仑碰撞对快离子损失和轨道的影响类型，我们将改变其平行速度符号的快离子标记为香蕉粒子，采用 ISSDE 来跟踪粒子的轨道并计算出快离子的轨道类型。结果显示在5.3中。这些数据可以更好地对图5.12中的粒子损失和轨道类型进行量化。损失的粒子的轨道类型也取决于快离子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的初始分布。在垂直束中的香蕉离子的比例要比在切向束中的香蕉离子比例更大。表中突出的是，由库仑碰撞引起的香蕉粒子的比例非常高。碰撞造成的香蕉粒子的比例非常高。对于垂直束，这部分粒子达到 92.31%。对于切向束，当香蕉粒子的总比例只有 2.58% 时，由库仑碰撞引起的损失的离子中香蕉粒子的比例仍然可以达到 58.65%。所以碰撞对香蕉离子的损失有较大的影响。

由库仑碰撞引起的大多数损失的粒子在初始时刻都在 LCFS 附近。也就是说，它们中的大多数是边际粒子。碰撞造成的损失与投掷角散射有关。边际粒子由于投掷角散射，有更多的机会进入直接损失区。这项研究支持以前观察到的证据（如 Chang 等人^[104]）。

表 5.3 快离子损失与碰撞，香蕉轨道粒子份额的关系

入射中性束	A0beam1	A0beam2
香蕉粒子份额（无）	0.0258	0.3092
香蕉粒子份额（含）	0.0340	0.3293
损失粒子中香蕉粒子份额（无）	0.0203	0.2090
损失粒子中香蕉粒子的份额（含）	0.0384	0.2602
碰撞引起损失粒子中香蕉粒子份额	0.5865	0.9231

为了研究碰撞对损失粒子的影响，我们使用 ISSDE 来跟踪每个粒子，直到损失时刻。由库仑碰撞引起的 $P_\zeta - \Lambda$ 空间中每个能量为 E_1 , E_2 和 E_3 的损失粒子的初始时刻和损失时刻的分布如图5.15所示。由于碰撞，损失粒子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的位置变化很大。我们可以把这些变化分为两种情况。一种是 $P_\zeta - \Lambda$ 空间中损失粒子位置从约束区变成了损失区，另一种情况是粒子仍然在约束区，但是粒子却发生了损失。对于这两种情况，我们分别在垂直束中选择能量为 E_1 的 4 个粒子，并在位置空间中画出它们的轨道。我们在图5.16中显示了所选的粒子，在图5.17和图5.18中显示相应粒子轨道。在图5.16中，蓝色的“*”和“o”表示情况一，而红色“*”和“o”代表情况二。在5.17和5.18中，黑色的“*”表示在碰撞影响下的快离子的损失位置。因为这些粒子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间对应 LCFS 的最小磁场强度边

界附近，在碰撞的影响下，它们将在中平面的弱磁场侧附近损失。在位置空间的运动轨迹在情况一和情况二中没有太大区别。这些数据表明，当我们考虑快离子的投掷角散射损失时， $P_\zeta - \Lambda$ 空间的分布可能没有给出所有的损失，仍然需要粒子轨迹演化信息。

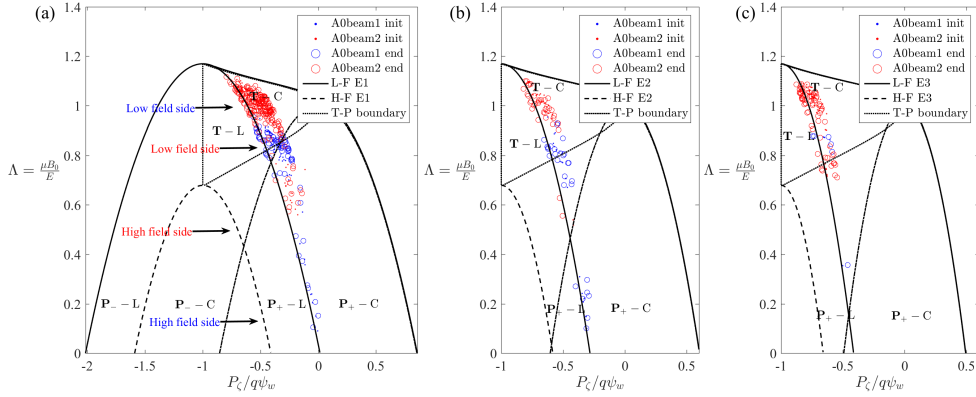


图 5.15 在切向束和垂直束中由库仑碰撞引起的损失离子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间不同时间的分布。蓝点代表初始时刻的位置，红圈代表每个粒子损失时刻的位置。

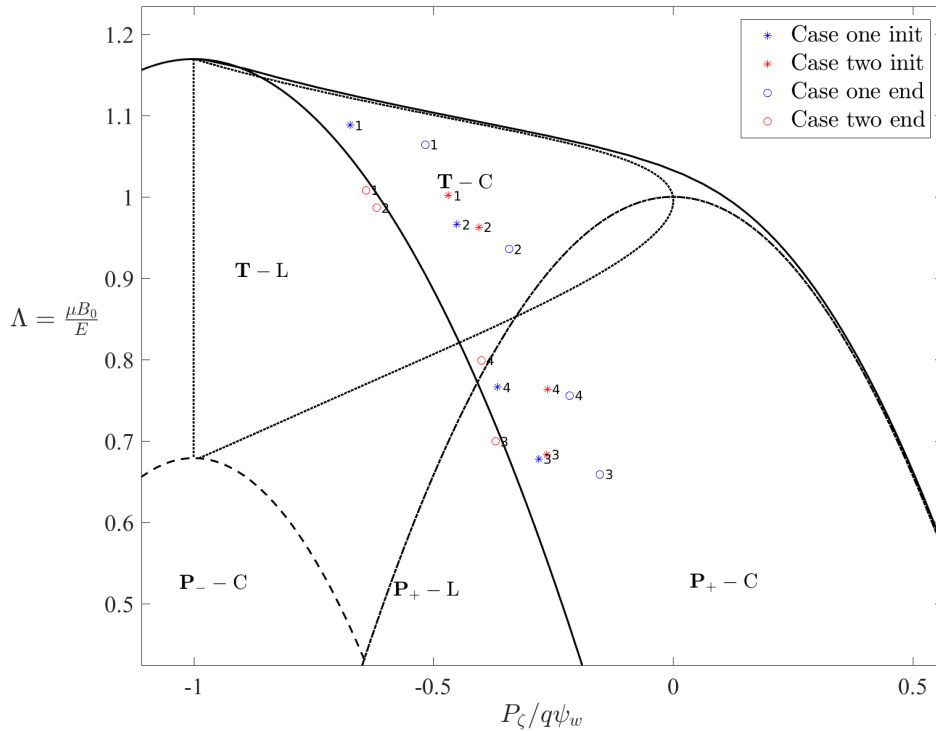


图 5.16 图5.15-(a) 中垂直束几个典型粒子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的分布，编号为 1-4。蓝色和红色代表情况一和情况二。情况一是失去的粒子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的位置由约束区变到损失区，而情况二是粒子仍然在约束区，但粒子损失了。

与短时间尺度的直接损失相比，库仑碰撞造成的损失是长时间尺度的并有

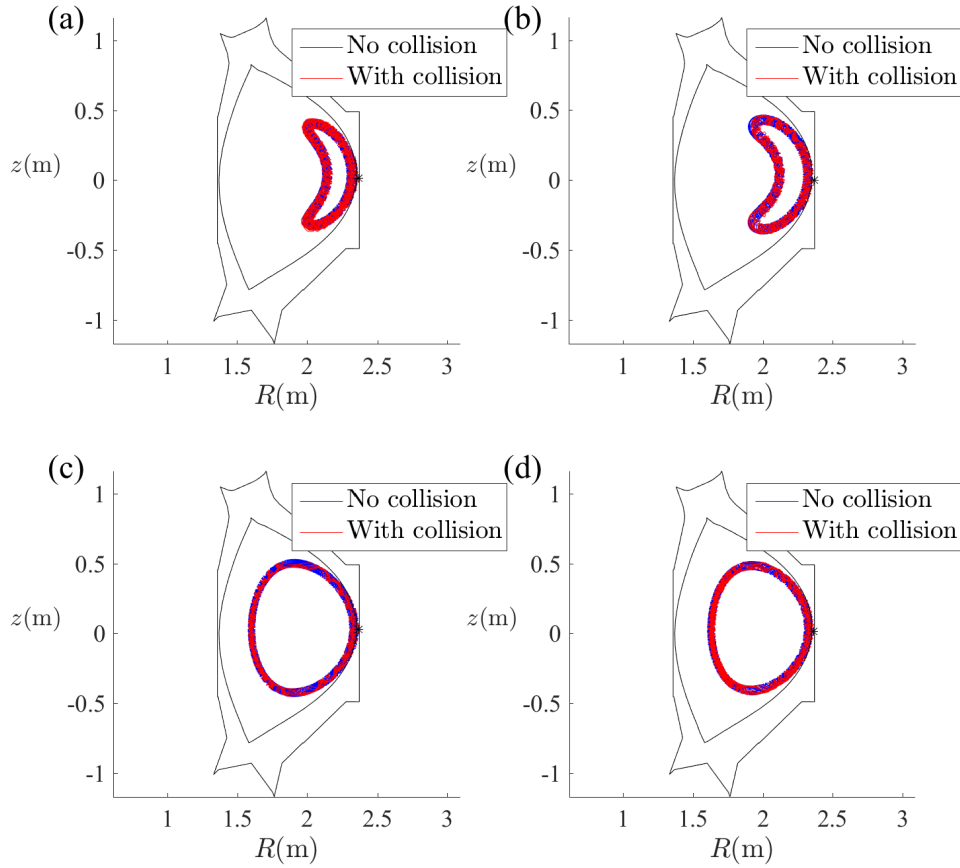


图 5.17 对应图5.16中情况一中标记为 1-4 的典型粒子轨道

一个连续的影响。将计算的总时间扩展到 $5.85 \times 10^6 T_{ic}$ ，我们得到的粒子损失如图5.19所示。与直接损失的损失速率相比，库仑碰撞引起的损失速率较小。我们假设平均背景粒子温度为 2.3 keV，而能量大于平均背景粒子温度的 3/2 的入射粒子是快离子。不计入直接损失粒子，在 $5.85 \times 10^6 T_{ic}$ 内，切向束和垂直束由库仑碰撞引起的额外快离子损失分别占总粒子数的 16.21% 和 25.05%。这些结果与导心轨道程序 GYCAVA 在类似条件下计算的结果一致，如参考文献^[105] 中图 8 所示。结果数值大小的不一致主要源于平衡磁场的不同。在磁漂移和库仑碰撞的共同作用下，大多数由库仑碰撞引起的损失粒子位置在 P4，如图5.20所示。由库仑碰撞引起的快离子损失的初始位置分布如图5.20-(b), (d)。有趣的是，与图5.8, 5.9-(c) 所示的快离子损失相比，由库仑碰撞引起的快离子损失大部分集中在低场侧，并且在远离 LCFS 的区域周围有更多的快离子损失。库仑碰撞通过随机扩散和投掷角散射造成快离子的损失。我们可以看到平均面密度分布的变化，如图5.21和5.22所示。在直接损失发生后，大部分快离子被限制在等离子体中心。在库仑碰撞的作用下，发生投掷角散射。一些靠近 LCFS 的粒子发生投掷角散射损失。而远离 LCFS 的粒子将经历一个由多个投掷角散射形成的扩散过程。在扩

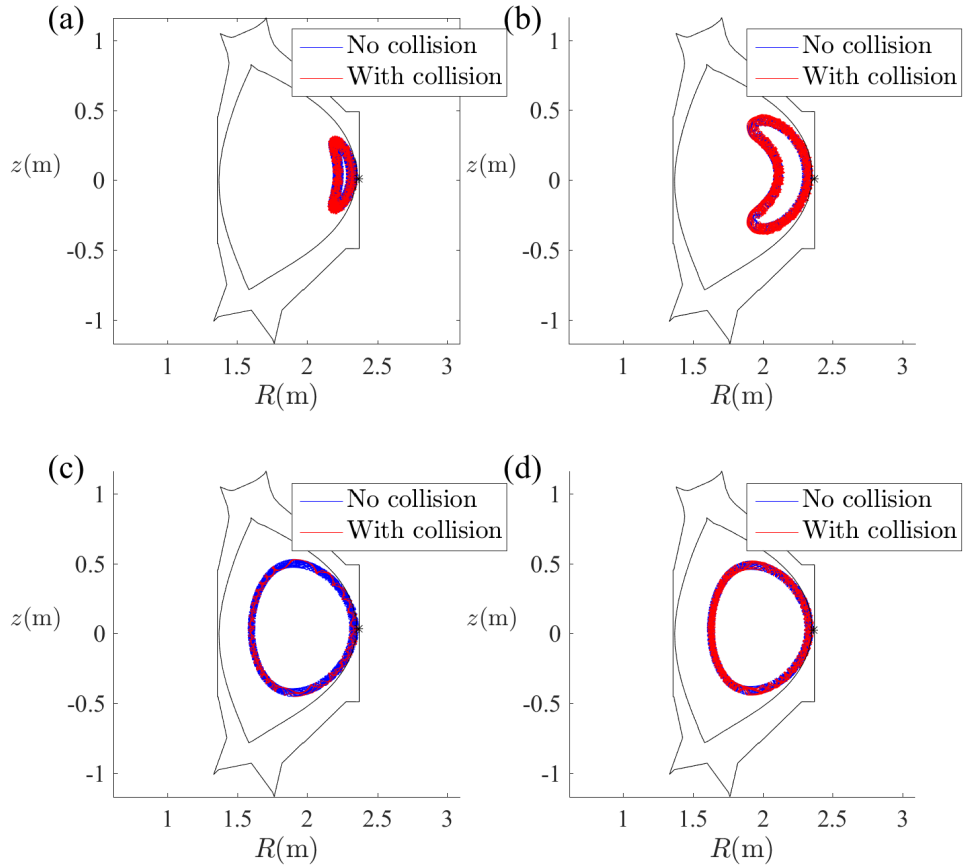


图 5.18 对应图5.16中情况二中标记为 1-4 的典型粒子轨道

散过程中，一部分快离子逐渐接近 LCFS 并最终损失，而另一部分快离子则变为热离子。

5.4 快离子在碰撞作用下的慢化与能量沉积

快离子的慢化过程将加热背景等离子体。我们可以把快离子物理量系综平均随时间的变化分为两个阶段，即速度空间扩散阶段和慢化阶段。用 ISSDE 计算的慢化过程中快离子的速度和能量的系综平均演化如图5.23和5.26所示。在 $8 \times 10^4 T_{ic}$ 时间内，快离子的系综平均速度和能量在环形磁场的影响下发生振荡，离子的系综平均动能在平行和垂直方向上转移。由于具有不同初始能量的离子的损失率不同，离子的总系综平均动能略有下降。如图5.12所示，更多的能量为 65.224 keV 和 65.644 keV 的快离子发生损失。在碰撞的作用下，快离子的系综平均速度和能量将达到平衡。与切向注入相比，垂直注入需要更长的时间来达到平衡。因为在垂直注入中，香蕉离子的比例更高。更多的离子会回弹，速度空间扩散需要更长的时间。

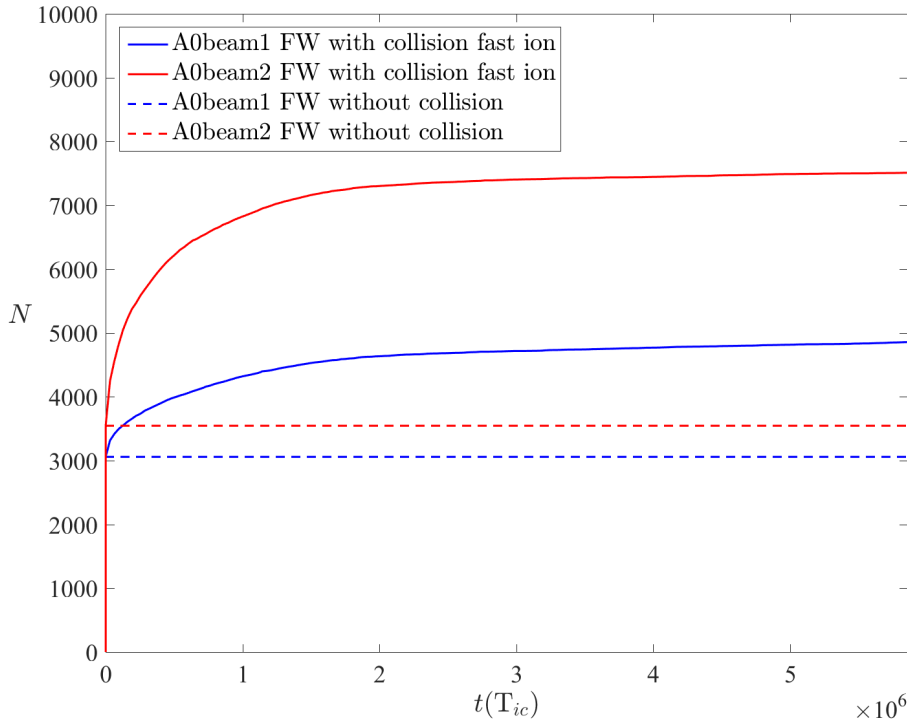


图 5.19 当总时间为 $5.85 \times 10^6 T_{ic}$ 时，库伦碰撞影响下的快离子损失演化，蓝色和红色实线显示了切向束和垂直束在 FW 边界的快离子损失。蓝色和红色的长虚线显示了没有碰撞时切向束和垂直束在 FW 边界上的损失。这些结果与文献^[105] 中的图 8 一致。

速度空间的扩散也可以直接由粒子在速度空间的分布看出，如图5.24-5.25。初始时刻，切向束和垂直束在速度空间为具有三种能量大小的粒子集合，是各向异性的，在碰撞和磁场的作用下，在速度空间逐渐变为各向同性。我们用红色、蓝色和黑色来代表 $1/3$ 总能量、 $1/2$ 总能量和总能量的粒子。在短的时间尺度上，如 $150 T_{ic}$ ，磁场将主要影响快离子在速度空间的运动。在这个过程中，速度空间中的快离子的相位差变得越来越大，而速度空间发生随机扩散。因为碰撞特征时间比离子回旋周期大 3 个数量级，因此在 $1000 T_{ic}$ 内，离子能量几乎不变，离子速度在磁场作用下在速度空间的固定球面上扩散。快离子系综能量随时间的变化如图5.26所示。

在速度空间扩散阶段中，由于时间比较短，因此看不出慢化过程，当我们将总时间步数设为 $5.85 \times 10^6 T_{ic}$ ，得到系综平均速度和能量随时间的演化如图5.27和图5.30。由图5.27可以看出，在库伦碰撞作用下，切向束和垂直束快离子平行方向速度逐渐减为 0 m/s 。由于在垂直方向速度没有规定方向，对应的是垂直速度大小，是由平行方向速度和总速度大小确定的。

快离子系综在平行速度和垂直速度空间随时间的演化如图5.28-5.29，在碰撞的作用下切向束和垂直束平行方向和垂直速度方向逐渐展宽，并且快离子速度

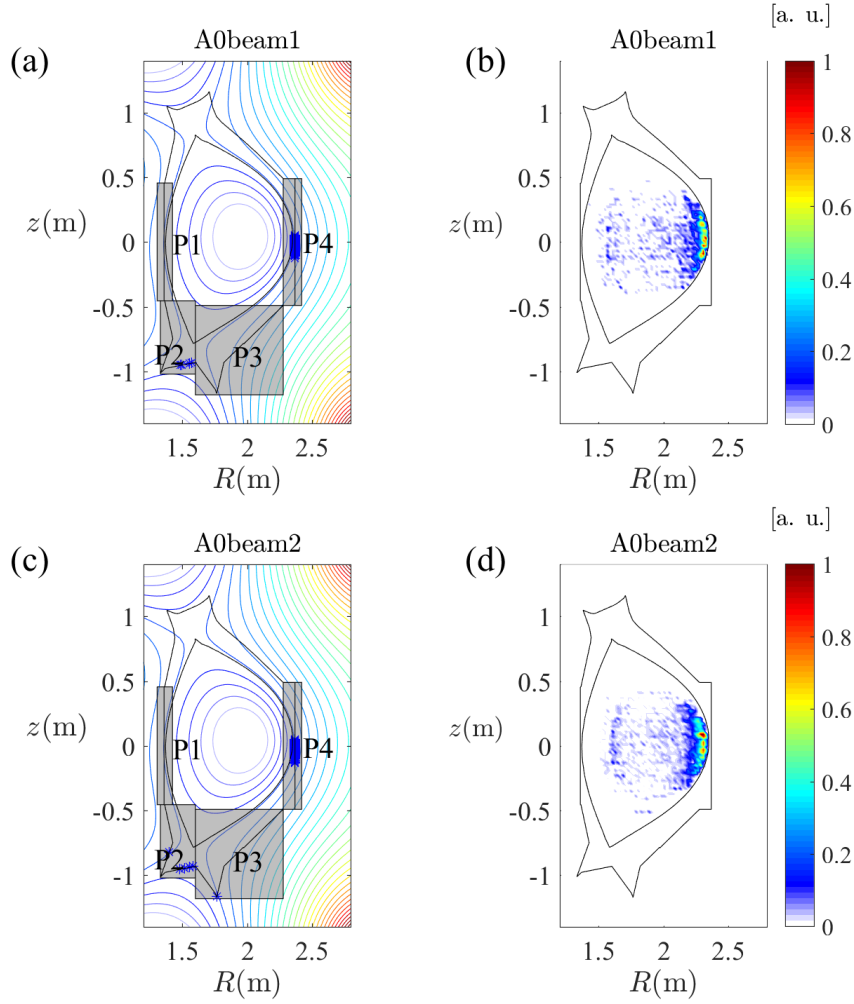


图 5.20 不包括直接损失，由库仑碰撞引起的快离子损失的位置和比例以及损失的快离子的初始分布。(a), (b) 是切向束的情况，(c), (d) 是垂直束的情况。灰色的正方形区域表示快离子在中平面以下的位置。在图 (a) 中，由 P4 的库仑碰撞引起的最终快离子损失占切向注入离子总数的 6%。在图 (c) 中，在 P4 处由库仑碰撞引起的最终快离子损失占总垂直注入离子的 13.22%。

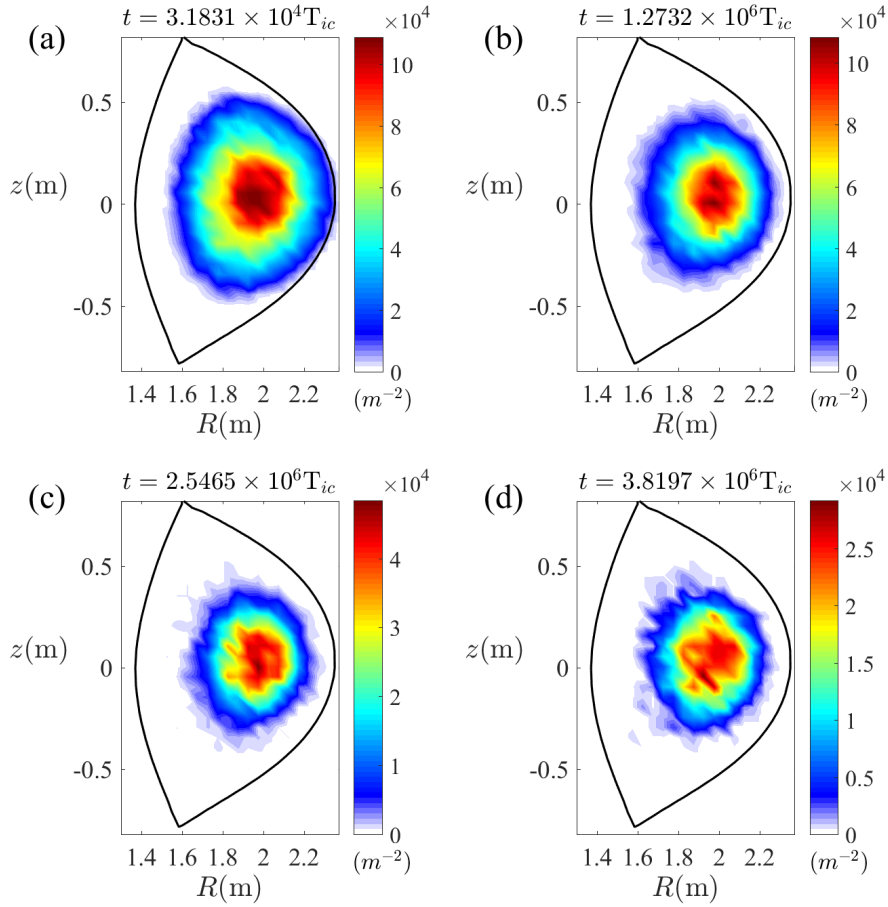


图 5.21 不同时刻的切向束快离子的平均密度分布

空间所在球面半径逐渐减小，这是因为在碰撞作用下快离子将能量传递给了背景等离子体。由图5.30可以看出，切向束和垂直束各个方向的能量都逐渐降低，最终趋于平衡值。

5.5 本章小结

针对不同的平衡参数位型，快离子初始时刻不同的分布，例如初始分布或者慢化分布，快离子在托卡马克装置中损失的情况都是不同的。根据 EFIT 程序计算所得等离子体平衡以及 NUBEAM 计算出的中性束沉积后的快离子初始分布，我们可以采用全轨道粒子追踪 Monte-Carlo 隐式模拟程序 ISSDE 来计算在库仑碰撞作用下，托卡马克中快离子的损失与慢化。其中平衡参数为 ISSDE 提供当地位置的密度等信息，将直接影响等离子体的碰撞参数，而快离子分布则作为初始时刻条件，不同快离子分布对应香蕉轨道粒子和通行轨道粒子份额的不同，因此也会影响快离子的损失的数量和位置。

对 #93910 炮两个同向束的计算结果表明，由于部分粒子在漂移出 LCFS 后

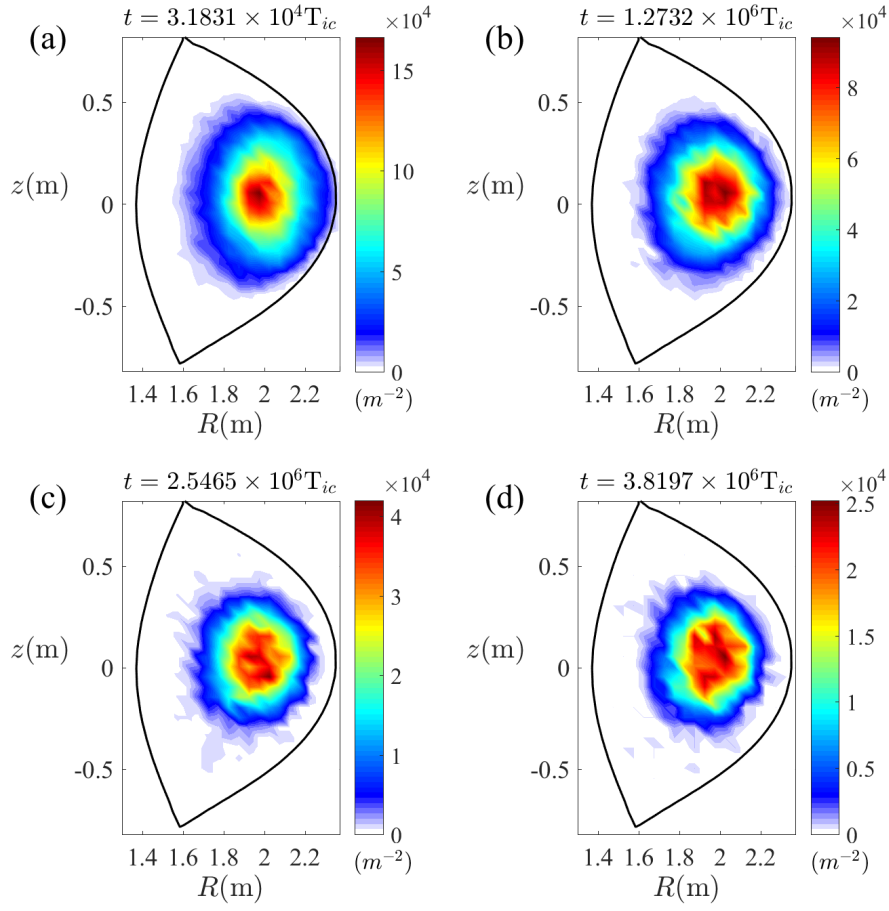


图 5.22 不同时刻的垂直束快离子的平均密度分布

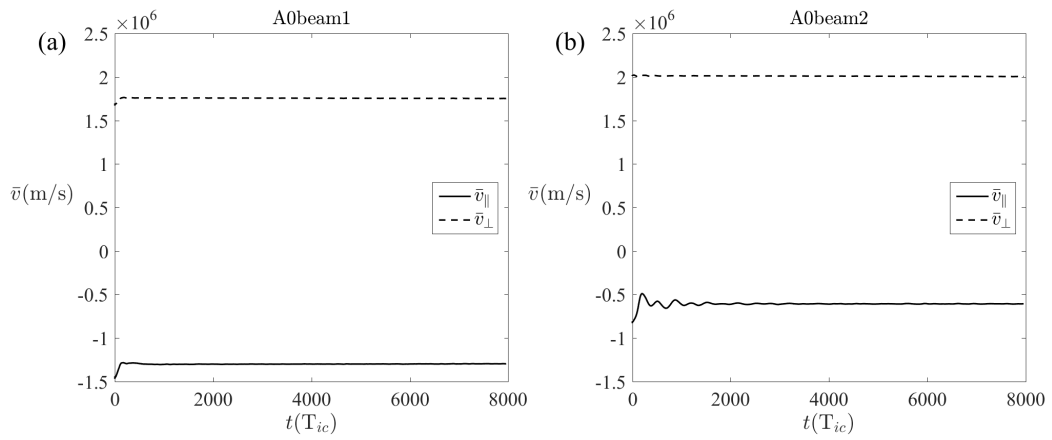


图 5.23 速度空间扩散阶段中快离子系综平均速度随时间的变化

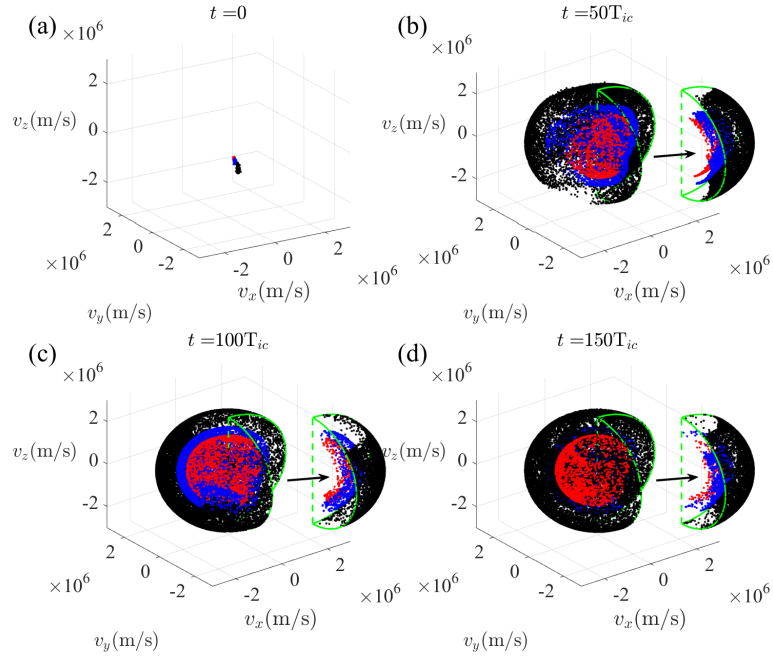


图 5.24 速度空间扩散阶段中快离子切向入射速度空间的演化

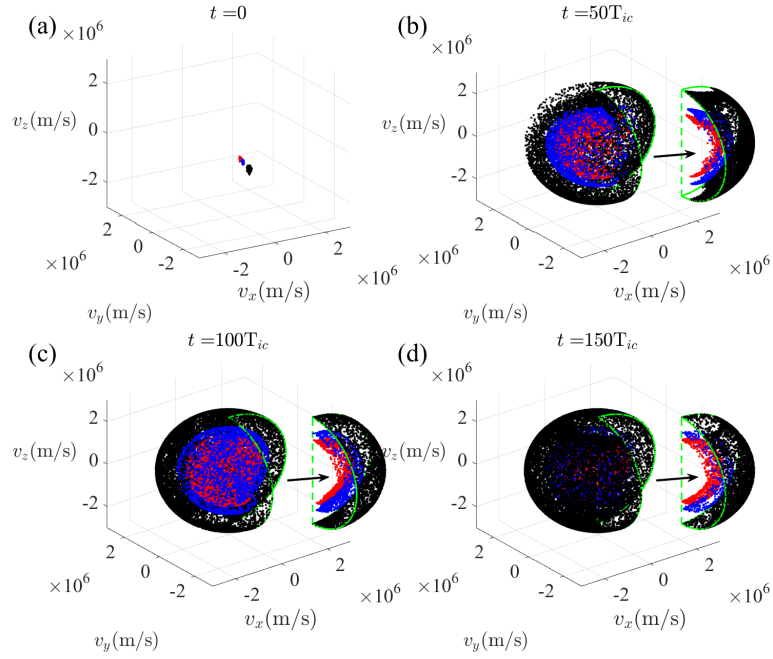


图 5.25 速度空间扩散阶段中快离子垂直入射速度空间的演化

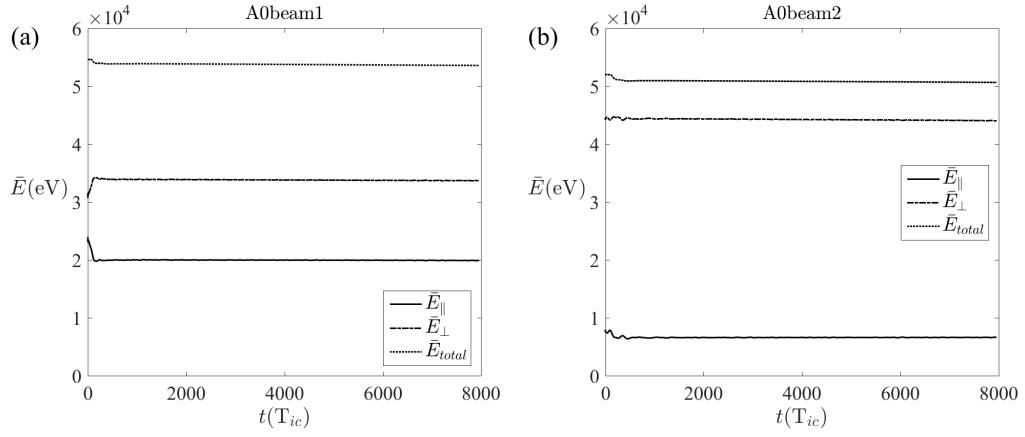


图 5.26 速度空间扩散阶段中快离子系统平均能量随时间的变化

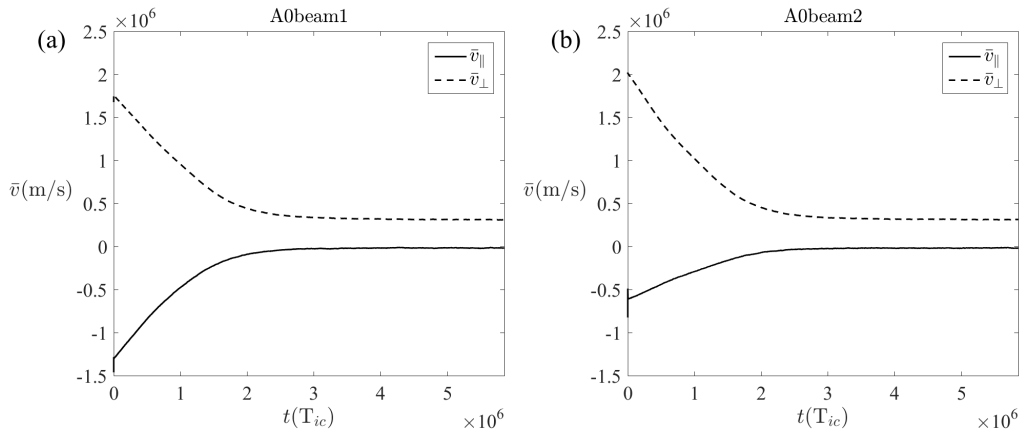
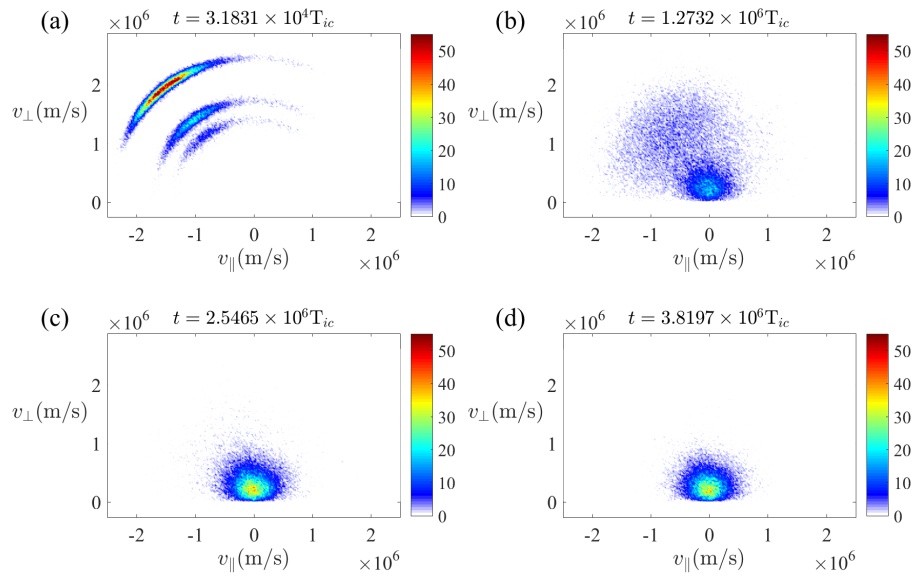

 图 5.27 当总时间步数为 $5.85 \times 10^6 T_{ic}$ 时, 慢化过程阶段中快离子系统平均速度随时间的演化


图 5.28 慢化过程阶段中快离子切向入射速度空间的演化

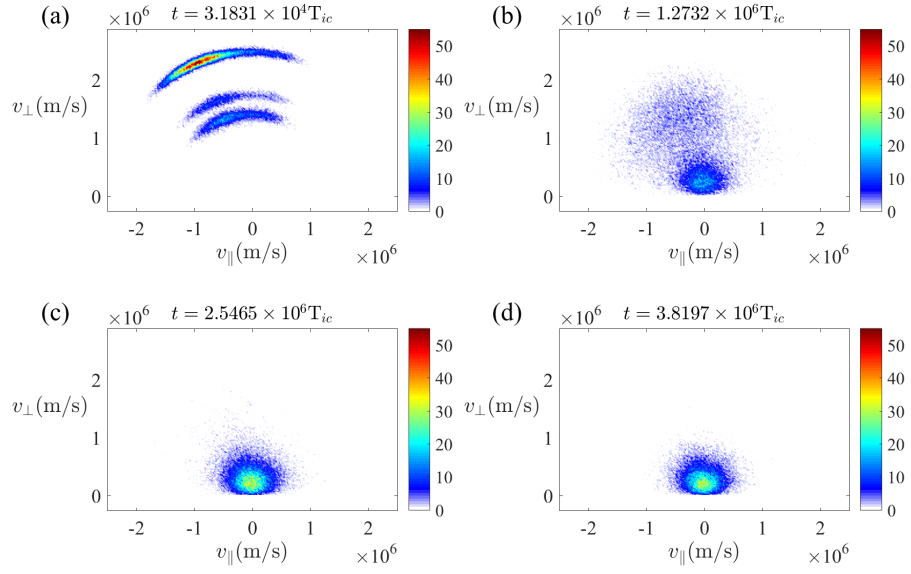
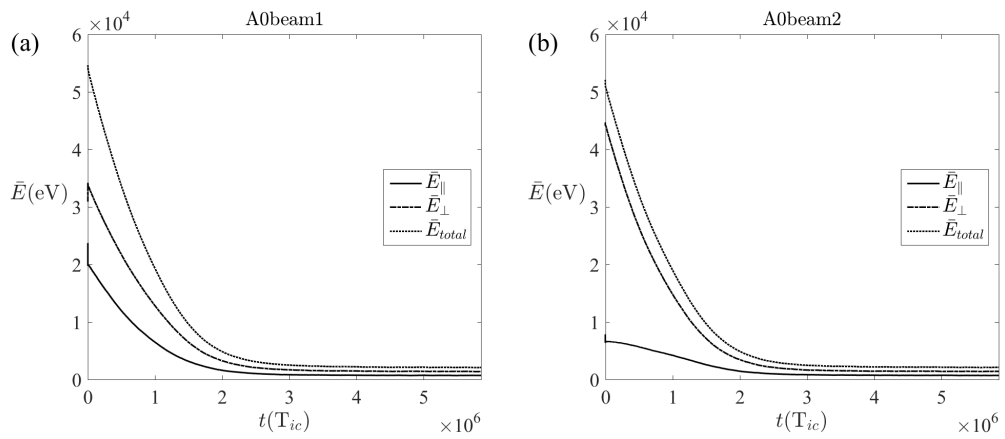


图 5.29 慢化过程阶段中快离子垂直入射速度空间的演化


 图 5.30 当总时间步数为 $5.85 \times 10^6 T_{ic}$ 时, 慢化过程阶段中快离子系统平均能量随时间的演化

并没有损失，而是重新回到 LCFS 内，再次被磁场俘获，因此相比于 LCFS 边界，采用 FW 边界定义直接损失更能够反映粒子的真实损失。垂直束比切向束中有更多的离子漂出 LCFS 并返回到 LCFS，所以使用 FW 边界定义的直接损失对垂直束更有意义。当考虑到库仑碰撞时，边际粒子将经历投掷角散射损失。快离子的直接损失率和轨道类型的比率取决于快离子在 $P_\zeta - \Lambda$ 空间的初始分布情况。由于库仑碰撞而损失的离子中，香蕉粒子的比例非常高。对于垂直光束，这部分粒子的比例是 92.31%。对于切向光束，当总香蕉粒子占到 2.58%，香蕉粒子在因碰撞而损失的粒子中的比例仍然达到了 58.65%。在长时间尺度的模拟中，库仑碰撞持续影响着快速离子的损失。投掷角散射和随机扩散在库仑碰撞导致的快离子损失中起着重要作用。我们将快离子的慢化分为速度空间扩散阶段和慢化阶段。快离子通过库仑碰撞与背景等离子体交换动量和能量，并向背景等离子体传递能量。

第6章 总结与展望

6.1 工作总结

含碰撞的等离子体系统因为粒子间的多体相互作用以及粒子与场的耦合而变得十分复杂，而由碰撞带来的物理过程是十分丰富的。作为 FP 方程求解的可替代方案，采用 SDE 的数值方法来对多尺度，多自由度的随机体系进行大规模的数值模拟是十分有意义的。

本文从 Klimontovich 方程出发，得到描述含碰撞等离子体的一般方程 Boltzmann 方程，再由库仑碰撞模型下对转移概率密度的定义，得到 RMJ 势表示下的 FP 方程。根据 Itô SDE 与 FP 方程的随机等价性，Itô SDE 与 Stratonovich SDE, kinetic SDE 的等价性关系得到 Stratonovich SDE, kinetic SDE 与 FP 方程的随机等价性，并根据背景粒子为 Lorentzian 等离子体，Maxwellian 等离子体得到对应的 Stratonovich SDE, kinetic SDE 的具体表达式，对背景粒子为任意分布的情况，也得到对应的 Stratonovich SDE 的表达式。再根据 Stratonovich 积分的定义与 Euler-Maruyama 数值方法的得到具有隐式中点格式的碰撞算法，采用分裂法将离散的 Stratonovich SDE 分为确定性部分和碰撞部分，对碰撞部分采用 Newton-Raphson 法和拟牛顿法进行计算，最终得到用于求解 Stratonovich SDE 的 Monte-Carlo 模拟程序 ISSDE，以此来研究等离子体中的弛豫过程和快离子损失过程。ISSDE 模拟程序具有标准化，模块化和可扩展的特点，能够进行高效的并行计算。

在 Lorentzian 等离子体中，采用 ISSDE 模拟了入射电子束在非磁化与磁化致密等离子体中的慢化过程，ISSDE 数值结果和 FP 方程解析数值解结果是一致的，由此可见 ISSDE 的准确性。Maxwellian 电子在同分布的 Maxwellian 电子中的弛豫过程的计算与物理是一致的。相比于随机 Runge-Kutta 方法，分裂法下的隐式中点格式的稳定性更高，不会因为误差积累而发散。采用 ISSDE 对电子束入射 Maxwellian 电子以及离子束入射 Maxwellian 电子慢化过程的计算体现了 ISSDE 的适用性。我们不仅可以得到粒子的轨迹信息，通过统计的手段，我们也可以得到物理量系综平均随时间的演化。

EAST 平衡位型下快离子的损失可以采用 ISSDE 作为粒子追踪程序来计算，计算等离子体平衡的 EFIT 程序和计算中性束沉积的 NUBEAM 程序作为输入程序为 ISSDE 提供背景等离子体平衡参数以及快离子的初始分布信息。采用 ISSDE 对 #093910 炮两个反向束进行了模拟，不仅可以追踪快离子的轨迹，还能探究碰撞对快离子损失的影响。分别考虑快离子的初始轨道损失 (损失边界为最外层闭合磁面) 和直接损失 (损失边界为第一壁)。作为全轨道程序，ISSDE 考虑了快离子的回旋运动，当回旋半径很大全轨道模拟能够更真实的反应粒子轨迹。模拟结

果表明, 在 ISSDE 全轨道模拟下, 相比于初始轨道损失, 直接损失更能够反映粒子的真实损失, 这是因为部分粒子在漂移出 LCFS 后并没有损失, 而是重新回到 LCFS 内, 再次被磁场俘获。相比于无碰撞的情况, 在碰撞的作用下, 快离子损失得更多。在碰撞影响下损失的粒子, 绝大部分都为香蕉轨道粒子。对垂直束而言, 损失的快离子中 92.31% 为香蕉轨道粒子, 而对于切向束, 在总香蕉粒子比例为 2.58% 时, 由碰撞引起损失的快离子中香蕉轨道的粒子的份额为 58.65%。因此, 碰撞对香蕉轨道粒子的影响更大。作为试探粒子碰撞程序, ISSDE 可以计算快离子在碰撞作用下的慢化过程。

6.2 未来工作展望

因为试探粒子模拟的简单和直观, 使得 ISSDE 隐式 Monte-Carlo 模拟程序能够方便的处理含碰撞的等离子体物理问题。特别是对于入射粒子分布函数复杂的情况, 由于 ISSDE 是追踪每一个粒子的轨迹, 因此不存在对分布函数复杂的刻画, 只需要通过统计的方法得到分布函数的信息即可。采用分裂法后, 对确定性部分可以采用各种保结构算法, 以此提高计算的稳定性。辛算法在确定性数值方法中发展得十分成熟。很自然的, 对随机系统也希望数值方法能够是或者接近辛算法。但实际上, 尽管针对随机微分方程发展了不少随机数值算法, 系统的随机辛算法还是很少。主要是由 Milstein 作出的工作^[106-107]。在这些工作中, 他们给出了辛 Runge-Kutta 方法, Langevin 型方程的准辛积分器被用于研究范围更广的物理问题。^[108-109] 不仅如此, 随机变分方法也被用来构造随机保辛算法。该构造方法和随机 Hamilton 原理有紧密的联系。随机 Hamilton 原理和离散方式以及相应的随机变分积分器已经有 L. J. Wang 开发出来。^[110] 如果能够找到含碰撞 SDE 对应的拉氏量, 在根据随机变分辛算法来计算, 对碰撞的计算将会有良好的性质。本文的算法是建立在牛顿力学体系上, 因此难以正确反映算法在相空间的解流信息。将含碰撞的等离子体的问题建立在哈密顿力学体系上, 找到相应的哈密顿量, 根据基于一类确定性块 Runge-Kutta 方法的推广的随机哈密顿系统的辛算法的理论^[106-107,111-113], 可以构造相应的辛算法, 这样能够使算法具有长期保真性质, 保证在不同尺度计算的全局稳定性。因此在未来的研究工作中将考虑随机哈密顿系统的辛算法的构造以及随机辛算法在相应物理问题上的应用。

作为只研究弛豫过程的试探粒子模型程序, ISSDE 在计算过程中只考虑了背景粒子对入射粒子的作用力, 而没有考虑入射粒子对背景的反作用力以及入射粒子之间的相互作用。考虑自洽场, 各种粒子之间的相互作用能够使对等离子体的模拟更加完备, 也能够研究更广泛的等离子体物理问题, 例如输运过程。在传统动理论模型或者保结构动理论模型中加入碰撞的影响, 将碰撞部分加入到

保结构 Particle-In-Cell 模拟程序, 例如变分辛 PIC^[114-115], 正则辛 PIC^[116]、或者非正则辛 PIC^[117] 等。保结构的随机辛算法也在不断的发展中, 如果能够得出保结构的碰撞算法, 对碰撞算法的发展将有很大的促进作用。这些将在未来的工作中进行开发。

kinetic 形式在物理意义上相比于 Itô 形式和 Stratonovich 形式更具优势, 它不仅给出随机动力学和确定性动力学一个自然的对应关系, 而且能够给出粒子轨迹动力学和 Boltzmann-Gibbs 分布一个直接的联系。^[118-121] 在给出 kinetic 具体积分定义后, 可以构造一个对应的势函数, 该势函数可以与 Boltzmann-Gibbs 分布有一个直接的对应关系。^[64-66] 对 kinetic SDE 的进一步开发或许可以发现更多的物理。

参 考 文 献

- [1] 项江. 非平衡等离子体碰撞项和输运系数的理论研究 [D]. 中国安徽合肥: 中国科学技术大学, 2005.
- [2] 王雨雷. 相对论性保结构粒子算法在等离子体多尺度过程中的应用 [D]. 中国合肥: 中国科学技术大学, 2017.
- [3] PERONA A, BORGOGNO D, ERIKSSON L G. A test electron model for the study of three dimensional magnetic reconnection effects [J/OL]. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(1): 86-95[2021-02-20]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010465513002816>. DOI: 10.1016/j.cpc.2013.08.018.
- [4] HAMILTON B, FLETCHER L, MCCLEMENTS K G, et al. Electron Acceleration at Re-connecting X-Points in Solar Flares [J/OL]. *ApJ*, 2005, 625(1): 496-505[2021-02-20]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1086/430100>.
- [5] PFEFFERLÉ D. VENUS-LEVIS and its spline-Fourier interpolation of 3D toroidal magnetic field representation for guiding-centre and full-orbit simulations of charged energetic particles [J]. *Computer Physics Communications*, 2014: 14.
- [6] DALENA S, CHUYCHAI P, MACE R, et al. Streamline generation code for particle dynamics description in numerical models of turbulence [J/OL]. *Computer Physics Communications*, 2012, 183(9): 1974-1985[2021-02-20]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010465512001610>. DOI: 10.1016/j.cpc.2012.04.022.
- [7] TAUTZ R C. A new simulation code for particle diffusion in anisotropic, large-scale and turbulent magnetic fields [J/OL]. *Computer Physics Communications*, 2010, 181(1): 71-77 [2021-02-20]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010465509002811>. DOI: 10.1016/j.cpc.2009.09.002.
- [8] QIN H, GUAN X. Variational Symplectic Integrator for Long-Time Simulations of the Guiding-Center Motion of Charged Particles in General Magnetic Fields [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 100: 035006.
- [9] HE Y, SUN Y, LIU J, et al. Volume-preserving algorithms for charged particle dynamics [J]. *J. Comput. Phys*, 2015, 281: 135-147.
- [10] HE Y, SUN Y, LIU J, et al. Higher order volume-preserving schemes for charged particle dynamics [J/OL]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 305: 172-184[2021-02-20]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999115007081>. DOI: 10.1016/j.jcp.2015.10.032.
- [11] ZHANG R, LIU J, QIN H, et al. Application of Lie Algebra in Constructing Volume-

- Preserving Algorithms for Charged Particles Dynamics [J/OL]. Commun. Comput. Phys., 2016, 19(5): 1397-1408[2021-02-20]. https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S1815240616000591/type/journal_article. DOI: 10.4208/cicp.scpde14.33s.
- [12] KERBEL G D, MCCOY M G. Kinetic theory and simulation of multispecies plasmas in tokamaks excited with electromagnetic waves in the ion-cyclotron range of frequencies [J/OL]. Phys. Fluids, 1985, 28(12): 3629[2020-10-10]. <https://doi.org/10.1063/1.865319>.
- [13] EPPERLEIN E, RICKARD G, BELL A. A code for the solution of the Vlasov-Fokker-Planck equation in 1-D or 2-D [J/OL]. Comput. Phys. Commun, 1988, 52(1): 7-13[2020-05-09]. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(88\)90165-8](https://doi.org/10.1016/0010-4655(88)90165-8).
- [14] MOREL J E. Fokker-Planck Calculations Using Standard Discrete Ordinates Transport Codes [J/OL]. Nucl. Sci. Eng, 1981, 79(4): 340-356[2020-05-09]. <https://doi.org/10.13182/nse79-340>. DOI: 10.13182/NSE79-340.
- [15] RICKETSON L, ROSIN M, CAFLISCH R, et al. An entropy based thermalization scheme for hybrid simulations of Coulomb collisions [J/OL]. J. Comput. Phys, 2014, 273: 77-99 [2019-10-14]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999114003398>. DOI: 10.1016/j.jcp.2014.04.059.
- [16] 郑艺峰, 王雨雷, 刘健, 等. ISSDE: 基于第一性原理随机微分方程的碰撞等离子体隐式模拟 [J/OL]. 计算物理, 2019, 36(3): 265-279. DOI: 10.19596/j.cnki.1001-246x.7843.
- [17] 刘玲. 随机微分方程的数值解 [D/OL]. 中国安徽合肥: 中国科学技术大学, 2016[2018-03-23]. http://www.wanfangdata.com.cn/details/detail.do?_type=degree&id=Y3020658.
- [18] 赵鹏程. 两类随机微分方程解的稳定性分析 [D/OL]. 中国黑龙江哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2014[2018-03-23]. http://www.wanfangdata.com.cn/details/detail.do?_type=degree&id=D592510.
- [19] ITO K. On stochastic differential equations [M]. American Mathematical Society, 1967.
- [20] TIAN T, BURRAGE K. Implicit Taylor methods for stiff stochastic differential equations [J/OL]. Applied Numerical Mathematics, 2001, 38(1-2): 167-185[2019-03-05]. <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168927401000344>. DOI: 10.1016/S0168-9274(01)00034-4.
- [21] KLOEDEN P E, PLATEN E. Applications of mathematics: number 23 numerical solution of stochastic differential equations [M/OL]. Berlin: Springer, 2010. <https://doi.org/10.1002/9781118603338.ch13>.
- [22] RUMELIN W. Numerical Treatment of Stochastic Differential Equations [J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1982, 19(3): 10.
- [23] HIGHAM D J. An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations [J]. 2001: 22.

- [24] HULL J C. Options, Futures, and Other Derivatives [M]. 2009.
- [25] MAO X. Stochastic differential equations and applications [M]. UK: Woodhead, 2007.
- [26] 吴大俊. EAST 电子回旋加热高功率毫米波传输关键技术研究 [D]. 安徽合肥: 中国科学技术大学, 2019.
- [27] UDAKOV L I R. COLLECTIVE SLOWING DOWN OF AN INTENSE BEAM OF RELATIVISTIC ELECTRONS IN A DENSE PLASMA TARGET [J]. Soviet Physics Jetp, 1971, 32(6): 1134.
- [28] HUSSEINY A A, FORSEN H K. Scattering Probability for Fast Test Particles in a Plasma [J/OL]. Phys. Rev. A, 1970, 2(5): 2019-2024[2021-02-20]. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.2.2019>.
- [29] 施研博, 应阳君, 李金鸿. α 粒子的慢化过程对 D-T 等离子体聚变燃烧的影响 [J/OL]. 物理学报, 2007[2018-03-23]. http://www.wanfangdata.com.cn/details/detail.do?_type=periodic&id=wlxb200712021.
- [30] DAR A, Grunzweig-Genossar J, PERES A, et al. Slowing Down of Ions by Ultrahigh-Density Electron Plasma [J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1974, 32(23): 1299-1301[2021-02-20]. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.32.1299>.
- [31] 董超. 等离子体中温度弛豫的理论研究 [D/OL]. 中国安徽合肥: 中国科学技术大学, 2014[2018-03-23]. http://www.wanfangdata.com.cn/details/detail.do?_type=degree&id=Y2512861.
- [32] 黄千红, 张海琼, 肖舒颜. 中性束注入等离子体产生的快离子空间分布数值模拟 [J]. 科技资讯, 2014, 23: 8.
- [33] WU B, WANG J, LI J, et al. Neutral beam injection simulation of EAST [J/OL]. Fusion Engineering and Design, 2011, 86(6-8): 947-950[2020-12-23]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0920379611001992>. DOI: 10.1016/j.fusengdes.2011.01.148.
- [34] PINCHES S D, CHAPMAN I T, LAUBER P W, et al. Energetic ions in ITER plasmas [J/OL]. Physics of Plasmas, 2015, 22(2): 021807[2021-02-23]. <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4908551>.
- [35] HE K, SUN Y, WAN B, et al. Full-orbit simulation of fast ion loss under resonant magnetic perturbations in the EAST tokamak [J/OL]. Nucl. Fusion, 2021, 61(1): 016009[2021-02-23]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1741-4326/abbe74>.
- [36] 王杰, 向东, 曹锦佳, 等. 托卡马克中局域磁扰动引起的高能量离子损失研究 [J]. 核聚变与等离子体物理, 2019, 39(1): 10.
- [37] WU G, ZHANG X. Calculations of the Ion Orbit Loss Region at the Plasma Edge of EAST [J/OL]. Plasma Sci. Technol., 2012, 14(9): 789-793[2021-02-21]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1009-0630/14/9/03>.

- [38] Mou Mao-Lin, Liu Yu, Wang Zhong-Tian, et al. Prompt loss of energetic ion in tokamak [J/OL]. wlx, 2014, 63(16): 165201[2021-02-20]. <http://wulixb.iphy.ac.cn/article/doi/10.7498/aps.63.165201>.
- [39] STACEY W M. The effect of ion orbit loss and X-loss on the interpretation of ion energy and particle transport in the DIII-D edge plasma [J/OL]. Physics of Plasmas, 2011, 18(10): 102504[2021-02-22]. <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3640506>.
- [40] THOMAS A, TZOUFRAS M, ROBINSON A, et al. A review of Vlasov–Fokker–Planck numerical modeling of inertial confinement fusion plasma [J/OL]. J. Comput. Phys, 2012, 231(3): 1051-1079[2020-09-20]. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2011.09.028>.
- [41] ROSIN M S, RICKETSON L F, DIMITS A M, et al. Multilevel Monte Carlo simulation of Coulomb collisions [J/OL]. J. Comput. Phys, 2014, 274: 140-157. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.05.030>.
- [42] TAKIZUKA T, ABE H. A binary collision model for plasma simulation with a particle code [J/OL]. J. Comput. Phys, 1977, 25(3): 205-219[2019-09-19]. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(77\)90099-7](https://doi.org/10.1016/0021-9991(77)90099-7).
- [43] ERIKSSON L G. Monte Carlo operators for orbit averaged Fokker Planck equations [J/OL]. Phys. Plasmas, 1994, 1: 308. <https://doi.org/10.1063/1.870832>.
- [44] ERIKSSON L G, MANTSINEN M J, HELLSTEN T, et al. On the orbit-averaged Monte Carlo operator describing ion cyclotron resonance frequency wave–particle interaction in a tokamak [J/OL]. Phys. Plasmas, 1999, 6(2): 513-518[2019-09-14]. <https://doi.org/10.1063/1.873195>.
- [45] CADJAN M G, IVANOV M F. Langevin approach to plasma kinetics with Coulomb collisions [J/OL]. J. Plasma. Phys, 1999, 61(1): 89-106[2019-03-05]. <https://doi.org/10.1017/S0022377898007363>. DOI: 10.1017/S0022377898007363.
- [46] SHERLOCK M. A Monte-Carlo method for coulomb collisions in hybrid plasma models [J/OL]. J. Comput. Phys, 2008, 227(4): 2286-2292[2019-03-05]. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2007.11.037>.
- [47] ZHANG G, del-Castillo-Negrete D. A backward Monte-Carlo method for time-dependent runaway electron simulations [J/OL]. Phys. Plasmas, 2017, 24(9): 092511[2020-10-10]. <https://doi.org/10.1063/1.4986019>.
- [48] STEVENS D E. A new approach to charged particle slowing down dispersion [J/OL]. 2016. DOI: 10.2172/1248284.
- [49] BOSWELL R W, MOREY I J. Self-consistent simulation of a parallel-plate rf discharge [J/OL]. Appl. Phys. Lett., 1988, 52(1): 21-23[2021-02-20]. <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.99327>.
- [50] SURENDRA M, GRAVES D B, JELLUM G M. Self-consistent model of a direct-current

- glow discharge: Treatment of fast electrons [J/OL]. *Phys. Rev. A*, 1990, 41(2): 1112-1125 [2021-02-20]. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.41.1112>.
- [51] VENDER D, BOSWELL R. Numerical modeling of low-pressure RF plasmas [J/OL]. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, 1990, 18(4): 725-732[2021-02-20]. <https://ieeexplore.ieee.org/document/57527/>. DOI: 10.1109/27.57527.
- [52] WHITE R B, CHANCE M S. Hamiltonian guiding center drift orbit calculation for plasmas of arbitrary cross section [J]. *The Physics of Fluids*, 1984, 27: 2455.
- [53] TANI K, TAKIZUKA T, AZUMI M, et al. Ripple loss of suprathermal alpha particles during slowing-down in a tokamak reactor [J]. *Nucl. Fusion*, 1983, 23: 657.
- [54] HIRVIJOKI E, ASUNTA O, KOSKELA T, et al. ASCOT: Solving the kinetic equation of minority particle species in tokamak plasmas [J/OL]. *Computer Physics Communications*, 2014, 185(4): 1310-1321[2020-12-03]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0010465514000277>. DOI: 10.1016/j.cpc.2014.01.014.
- [55] YE L, GUO W, XIAO X, et al. Simulation of the alpha particle heating and the helium ash source in an International Thermonuclear Experimental Reactor-like tokamak with an internal transport barrier [J/OL]. *Phys. Plasmas*, 2014, 21(12): 122508[2020-12-03]. <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4903849>.
- [56] XU Y, GUO W, YE L, et al. Loss and redistribution of energetic passing ions with resonant magnetic perturbations [J]. *Phys. Plasmas*, 2018: 10.
- [57] XU Y, GUO W, HU Y, et al. Monte Carlo orbit-following simulations including the finite Larmor radius effect based on a phase-space coordinate transform method [J]. *Computer Physics Communications*, 2019: 9.
- [58] FASOLI A, GORMENZANO C, BERK H L, et al. Physics of energetic ions [J]. *Nucl. Fusion*, 2007, 47: S264-S284.
- [59] HIRVIJOKI E, BRIZARD A, SNICKER A, et al. Monte Carlo implementation of a guiding-center Fokker-Planck kinetic equation [J/OL]. *Physics of Plasmas*, 2013, 20(9): 092505 [2019-09-14]. <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4820951>.
- [60] KRAMER G J, BUDNY R V, BORTOLON A, et al. A description of the full-particle-orbit-following SPIRAL code for simulating fast-ion experiments in tokamaks [J/OL]. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2013, 55(2): 025013[2021-02-20]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0741-3335/55/2/025013>.
- [61] XU X, XU Y, ZHANG X, et al. Simulations of first-orbit losses of neutral beam injection (NBI) fast ions on EAST [J/OL]. *Plasma Sci. Technol.*, 2020, 22(8): 085101[2020-10-19]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2058-6272/ab8973>.
- [62] XU Y, LI L, HU Y, et al. Numerical simulations of NBI fast ion loss with RMPs on the EAST

- tokamak [J]. Nucl. Fusion, 2020: 15.
- [63] PFEFFERL D. Effects of magnetic ripple on 3D equilibrium and alpha particle confinement in the European DEMO [J]. Nucl. Fusion, 2016: 15.
- [64] KLIMONTOVICH Y L. Ito, Stratonovich and kinetic forms of stochastic equation [J/OL]. Physica A, 1990, 163: 515-532. DOI: 10.1016/0378-4371(90)90142-F.
- [65] KLIMONTOVICH Y. Alternative description of stochastic processes in nonlinear systems. “Kinetic form” of master and Fokker-Planck equations [J/OL]. Physica A, 1992, 182(1-2): 121-132[2021-03-02]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/037843719290233G>. DOI: 10.1016/0378-4371(92)90233-G.
- [66] AO P. Emerging of Stochastic Dynamical Equalities and Steady State Thermodynamics from Darwinian Dynamics [J/OL]. Commun. Theor. Phys., 2008, 49(5): 1073-1090[2021-03-01]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0253-6102/49/5/01>.
- [67] COHEN R S, SPITZER L, ROUTLY P M. The Electrical Conductivity of an Ionized Gas [J/OL]. Phys. Rev, 1950, 80(2): 230-238[2020-07-23]. <https://doi.org/10.21236/ad0289012>. DOI: 10.1103/PhysRev.80.230.
- [68] FITZPATRICK R. Plasma Physics [M]. 2015.
- [69] ARNOLD L. Stochastic differential equations: Theory and applications [M]. New York: Wiley, 1974.
- [70] Hans Christian Ottinger. Stochastic processes in Polymeric Fluids [M]. Springer, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [71] ROSENBLUTH M N, MACDONALD W M, JUDD D L. Fokker-Planck Equation for an Inverse-Square Force [J/OL]. Phys. Rev, 1957, 107(1): 1-6[2019-03-06]. <https://doi.org/10.1103/physrev.107.1>. DOI: 10.1103/PhysRev.107.1.
- [72] HÜTTER M, CHRISTIAN ÖTTINGER H. Fluctuation-dissipation theorem, kinetic stochastic integral and efficient simulations [J/OL]. Faraday Trans., 1998, 94(10): 1403-1405[2021-03-03]. <http://xlink.rsc.org/?DOI=a800422f>. DOI: 10.1039/a800422f.
- [73] XIAO J, LIU J, QIN H, et al. Variational symplectic particle-in-cell simulation of nonlinear mode conversion from extraordinary waves to Bernstein waves [J/OL]. Phys. Plasmas, 2015, 22: 092305. <https://doi.org/10.1063/1.4930118>.
- [74] Ben-Israel A. A Newton-Raphson method for the solution of systems of equations [J/OL]. J. Math. Anal. Appl, 1966, 15(2): 243-252[2020-10-10]. [https://doi.org/10.1016/0022-247X\(66\)90115-6](https://doi.org/10.1016/0022-247X(66)90115-6). DOI: 10.1016/0022-247X(66)90115-6.
- [75] ORTEGA J M, RHEINBOLDT W C. Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables [M/OL]. United States of America: SIAM, 1987. <https://doi.org/10.1016/c2013-0-11263-9>.

- [76] BJÖRCK A. Numerical methods for least squares problems [M/OL]. United States of America: SIAM, 1996. <https://doi.org/10.1137/1.9781611971484>.
- [77] BROYDEN C G. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations [J/OL]. Math. Comput, 1965, 19(92): 577-577. <https://doi.org/10.1090/s0025-5718-1965-0198670-6>.
- [78] BROYDEN C G. The Convergence of a Class of Double-rank Minimization Algorithms 1. General Considerations [J/OL]. IMA J Appl Math, 1970, 6(1): 76-90[2020-06-05]. <https://academic.oup.com/imamat/article-lookup/doi/10.1093/imamat/6.1.76>.
- [79] BROYDEN C G. The Convergence of a Class of Double-rank Minimization Algorithms 2. The New Algorithm [J]. IMA Journal of Applied Mathematics, 1970, 6: 222-231.
- [80] QIN H, ZHANG S, XIAO J, et al. Why is Boris algorithm so good? [J/OL]. Physics of Plasmas, 2013, 20(8): 084503[2019-12-04]. <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4818428>.
- [81] 肖建元. 保结构算法在等离子体物理中的应用 [D]. 中国合肥: 中国科学技术大学, 2016.
- [82] DENNIS J E, SCHNABEL R B. Classics in applied mathematics: number 16 numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations [M]. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1996.
- [83] JR. J E D, MORÉ J J. Quasi-Newton Methods, Motivation and Theory [J/OL]. SIAM Rev., 1977, 19(1): 46-89[2020-06-04]. <http://epubs.siam.org/doi/10.1137/1019005>.
- [84] POWELL M. A New Algorithm for Unconstrained Optimization [M/OL]/Nonlinear Programming. Elsevier, 1970: 31-65[2020-06-05]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780125970501500063>. DOI: 10.1016/B978-0-12-597050-1.50006-3.
- [85] DAVIDON W C. Variable metric method for minimization [J/OL]. SIAM Journal on Optimization, 1959, 1(1): 1-17. <https://doi.org/10.1137/0801001>.
- [86] FLETCHER R, POWELL M J D. A rapidly convergent descent method for minimization [J/OL]. The Computer Journal, 1963, 6(2): 163-168. <https://doi.org/10.1093/comjnl/6.2.163>.
- [87] FLETCHER R. A new approach to variable metric algorithms [J/OL]. The Computer Journal, 1970, 13(3): 317-322. <https://doi.org/10.1093/comjnl/13.3.317>.
- [88] Donald Goldfarb. A Family of Variable-Metric Methods Derived by Variational Means [J/OL]. Mathematics of Computation, 1970, 24(109): 23. <https://doi.org/10.1090/s0025-5718-1970-0258249-6>.
- [89] SHANNO D F. Conditioning of Quasi-Newton Methods for Function Minimization [J]. Mathematics of Computation, 1970, 24(111): 10.
- [90] SHERMAN J, MORRISON W J. Adjustment of an inverse matrix corresponding to changes in the elements of a given column or a given row of the original matrix [J/OL]. The Annals of Mathematical Statistics, 1950, 21(1): 124-127. <https://doi.org/10.1214/aoms/1177729893>.

- [91] 庞立君. 求解随机微分方程的三级随机 Runge-Kutta 方法 [D]. 中国江苏南京: 河海大学, 2008.
- [92] The Programming Language Lua [EB/OL]. [2019-09-18]. <http://www.lua.org/>.
- [93] The HDF5® Library & File Format - The HDF Group [EB/OL]. [2019-09-18]. <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5/>.
- [94] MONTGOMERY D C, TIDMAN D A. Plasma Kinetic Theory [M]. McGRAW_HILL BOOK COMPANY, 1964.
- [95] GOEBEL D M, KATZ I. JPL space science and technology series: number 1 fundamentals of electric propulsion: Ion and Hall thrusters [M/OL]. Hoboken, N.J: Wiley, 2008. <https://doi.org/10.1002/9780470436448>.
- [96] BURRAGE P M. Runge-Kutta Methods for Stochastic Differential Equations [D/OL]. Queensland, Australia: The University of Queensland Brisbane, 1999. <https://core.ac.uk/download/pdf/15055225.pdf>.
- [97] BURRAGE K, BURRAGE P. High strong order methods for non-commutative stochastic ordinary differential equation systems and the Magnus formula [J/OL]. PHYSICA D, 1999, 133(1-4): 34-48[2020-10-19]. [https://doi.org/10.1016/s0168-9274\(96\)00027-x](https://doi.org/10.1016/s0168-9274(96)00027-x). DOI: 10.1016/S0167-2789(99)00097-4.
- [98] HU C, XIE Y, XIE Y, et al. Overview of Development Status for EAST-NBI System [J/OL]. Plasma Sci. Technol., 2015, 17(10): 817-825[2020-11-27]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1009-0630/17/10/02>.
- [99] LAO L, ST. JOHN H, STAMBAUGH R, et al. Reconstruction of current profile parameters and plasma shapes in tokamaks [J/OL]. Nucl. Fusion, 1985, 25(11): 1611-1622[2020-10-24]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0029-5515/25/11/007>.
- [100] LAO L. EFIT Tutorial Equilibrium Reconstruction Methods and Best Practices [Z]. San Diego, CA, 2013.
- [101] Manish Vachharajani. NUBEAM Help [J/OL]. NUMBEAM Help[2021-02-25]. <https://w3.pppl.gov/~pshare/help/nubeam.htm>.
- [102] 郝保龙. EAST 中性束注入下快离子损失研究 [D]. 安徽合肥: 中国科学技术大学, 2018.
- [103] WHITE R B, CHANCE M S. Hamiltonian guiding center drift orbit calculation for plasmas of arbitrary cross section [J/OL]. Phys. Fluids, 1984, 27(10): 2455[2020-11-02]. <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.864527>.
- [104] CHANG C S, ZWEBEN S J, SCHIVELL J, et al. Model for collisional fast ion diffusion into Tokamak Fusion Test Reactor loss cone [J]. Phys. Plasmas, 1994, 1: 3857.
- [105] XU L, SHEN W, REN Z, et al. Investigation of Alfvén eigenmodes and Energetic Particle Modes in EAST with neutral beam injection [J/OL]. Nucl. Fusion, 2021, 61: 076005[2021-

- 07-06]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1741-4326/abf2e2>.
- [106] MILSTEIN G N, REPIN Y M, TRETYAKOV M V. Numerical methods for stochastic systems preserving symplectic structure [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2002, 40(4): 1583-1604.
- [107] MILSTEIN G N, REPIN Y M, TRETYAKOV M V. Symplectic integration of Hamiltonian systems with additive noise [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2002, 39(6): 2066-2088.
- [108] MILSTEIN G N, TRETYAKOV M V. Quasi-symplectic methods for Langevin-type equations [J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2003, 23: 593-626.
- [109] MILSTEIN G N, TRETYAKOV M V. Computing ergodic limits for Langevin equations [J]. *Physica D*, 2007, 229: 81-95.
- [110] WANG L, HONG J, SCHERE R, et al. Dynamics and variational integrators of stochastic Hamiltonian systems [J]. *International Journal of Numerical Analysis and Modeling*, 2009, 6(4): 586-602.
- [111] KNOPS R J, MORTON K W. *Numerical Hamiltonian Problems*.djvu [M]. Chapman & Hall, 1994.
- [112] Sanz-Serna J M. Symplectic integrators for Hamiltonian problems: An overview [J/OL]. *Acta Numerica*, 1992, 1: 243-286[2021-02-20]. https://www.cambridge.org/core/product/identifier/S0962492900002282/type/journal_article. DOI: 10.1017/S0962492900002282.
- [113] DIMOV I, FARAGÓ I, VULKOV L, et al. *Lecture Notes in Computer Science: volume 8236 numerical Analysis and Its Applications: 5th International Conference, NAA 2012, Lozenetz, Bulgaria, June 15-20, 2012, Revised Selected Papers* [M/OL]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013[2021-02-20]. <http://link.springer.com/10.1007/978-3-642-41515-9>.
- [114] KRAUS M. Variational Integrators in Plasma Physics [J/OL]. arXiv:1307.5665, 2014[2020-10-10]. <http://arxiv.org/abs/1307.5665>.
- [115] XIAO J, LIU J, QIN H, et al. A variational multi-symplectic particle-in-cell algorithm with smoothing functions for the Vlasov-Maxwell system [J/OL]. *Phys. Plasmas*, 2013, 20: 102517. <https://doi.org/10.1063/1.4826218>.
- [116] QIN H, LIU J, XIAO J, et al. Canonical symplectic particle-in-cell method for long-term large-scale simulations of the Vlasov-Maxwell equations [J/OL]. *Nuclear Fusion*, 2016, 56: 014001. DOI: 10.1088/0029-5515/56/1/014001.
- [117] XIAO J, QIN H, LIU J, et al. Explicit high-order non-canonical symplectic particle-in-cell algorithms for Vlasov-Maxwell systems [J/OL]. *Phys. Plasmas*, 2015, 22: 112504. <https://doi.org/10.1063/1.4935904>.
- [118] YIN L, AO P. Existence and construction of dynamical potential in nonequilibrium processes

- without detailed balance [J/OL]. J. Phys. A: Math. Gen., 2006, 39(27): 8593-8601[2021-01-12]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/39/27/003>.
- [119] AOP, KWON C, QIAN H. On the existence of potential landscape in the evolution of complex systems [J/OL]. Complexity, 2007, 12(4): 19-27[2021-01-12]. <http://doi.wiley.com/10.1002/cplx.20171>.
- [120] SHI J, CHEN T, YUAN R, et al. Relation of a New Interpretation of Stochastic Differential Equations to Ito Process [J/OL]. J Stat Phys, 2012, 148(3): 579-590[2021-01-12]. <http://link.springer.com/10.1007/s10955-012-0532-8>.
- [121] YUAN R, AO P. Beyond Itô versus Stratonovich [J/OL]. J. Stat. Mech., 2012, 2012(07): P07010[2021-01-12]. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-5468/2012/07/P07010>.
- [122] Peter E. Kloeden, Eckhard Platen. Numerical Solution of Stochastic Differential Equation [M]. 1995.
- [123] TOCINO A. Multiple stochastic integrals with Mathematica [J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2009, 79: 1658-1667.

附录 A 随机 Runge-Kutta 方法

A.1 随机微分方程的随机 Taylor 展开

对随机微分方程进行的随机 Taylor 展开的基本思路是 1. 得到随机积分的链式法则的积分形式, 即 Itô 公式。2. 将随机微分方程等价积分解中的被积函数 $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 通过 Itô 公式进行反复迭代而来获得随机微分方程的随机 Taylor 展开式。下面以随机微分方程 (3.58) 的解析解的随机 Taylor 展开为例, 阐述一下随机 Taylor 展开的过程。首先介绍一下 Itô 公式, Itô 公式对应的是确定性常微分方程中的链式法则, 即随机微分方程应该满足的链式法则, 采用不同的积分形式将会有不同的积分法则。^[96,122]

定理 A.1 假如 $(y(t))_{t \in \mathbb{T}}$ 是由随机微分方程 $dy_t = f(t, y(t))dt + g(t, y(t))dW_t$ 表示的 Itô 过程, 如果 $F(t, x)$ 对 $t \in \mathbb{T}, x \in \mathbb{R}$ 是一个实值确定函数并有连续偏导数 $\partial F/\partial t$, $\partial F/\partial x$, 以及 $\partial^2 F/\partial x^2$, 那么随机过程 $(F(t, y))_{t \in \mathbb{T}}$ 也是一个 Itô 过程并且满足随机微分方程

$$dF(t, y) = \left[\frac{\partial F}{\partial t} dt + \frac{\partial F}{\partial y} f dt + \frac{1}{2} \text{trace}(g g^T \frac{\partial^2 F}{\partial y^2}) dt + \frac{\partial F}{\partial y} g dW_t \right]. \quad (\text{A.1})$$

对于标量形式有

$$dF(t, y) = \left[\frac{\partial F}{\partial t} dt + \frac{\partial F}{\partial y} f dt + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} g^2 \right) dt + \frac{\partial F}{\partial y} g dW_t \right]. \quad (\text{A.2})$$

将其写为等价的积分形式有

$$F(y(t)) - F(y(t_0)) = \int_{t_0}^t \left(\frac{\partial F}{\partial y} f + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} g^2 \right) ds + \int_{t_0}^t \frac{\partial F}{\partial y} g dW(s). \quad (\text{A.3})$$

令算符 L^0, L^1 满足

$$L^0 a(y) = \frac{\partial a}{\partial y} f + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} g^2, \quad L^1 a(y) = \frac{\partial a}{\partial y} g,$$

则方程 (A.3) 为

$$F(y(t)) - F(y(t_0)) = \int_{t_0}^t L^0 F(y(s)) ds + \int_{t_0}^t L^1 F(y(s)) dW(s). \quad (\text{A.4})$$

因为我们之后需要采用的积分形式为 Stratonovich 积分, 而 Stratonovich 积分的链式法则与 Itô 积分是不同的, 即 Stratonovich 积分的 Itô 公式与 Itô 积分是不同

的, 其不同形式在于算符 L^0, L^1 的不同, 对于 Stratonovich 积分, 算符 L_S^0, L_S^1 满足

$$L^0 a(y) = \frac{\partial a}{\partial y} f, \quad L^1 a(y) = \frac{\partial a}{\partial y} g. \quad (\text{A.5})$$

将方程 (3.58) 中的 $f(y(t))$ 和 $g(y(t))$ 根据 Stratonovich 积分的 Itô 公式 (A.4)-(A.5) 替换, 再反复迭代, 即可得到随机微分方程 (3.58) 在 y_0 处的 Taylor 展开。为了展示其中的细节, 我们将方程 (3.58) 展开到对应的三重随机 Stratonovich 积分。将方程 (3.58) 写成等价的积分形式有

$$y(t) = y(t_0) + \int_{t_0}^t f(y(s)) ds + \int_{t_0}^t g(y(s)) \circ dW(s), \quad (\text{A.6})$$

将被积函数 $f(y(s))$ 和 $g(y(s))$ 替换有

$$\begin{aligned} y(t) &= y(t_0) + \int_{t_0}^t [f(y(t_0)) + \int_{t_0}^s L^0 f(y(z)) dz + \int_{t_0}^s L^1 f(y(z)) \circ dW(z)] ds \\ &\quad + \int_{t_0}^t [g(y(t_0)) + \int_{t_0}^s L^0 g(y(z)) dz + \int_{t_0}^s L^1 g(y(z)) \circ dW(z)] \circ dW(s), \\ &= y(t_0) + f(y(t_0)) \int_{t_0}^t ds + g(y(t_0)) \int_{t_0}^t \circ dW(s) \\ &\quad + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s L^0 f(y(z)) dz ds + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s L^1 f(y(z)) \circ dW(z) ds \\ &\quad + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s L^0 g(y(z)) dz \circ dW(s) + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s L^1 g(y(z)) \circ dW(z) \circ dW(s), \end{aligned}$$

在将被积函数 $L^0 f(y(z))$, $L^1 f(y(z))$, $L^0 g(y(z))$, $L^1 g(y(z))$ 替换有

$$\begin{aligned}
 y(t) &= y(t_0) + f(y(t_0)) \int_{t_0}^t ds + g(y(t_0)) \int_{t_0}^t \circ dW(s) \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s [L^0 f(y(t_0)) + \int_{t_0}^z L^0 L^0 f(y(u)) du + \int_{t_0}^z L^1 L^0 f(y(u)) \circ dW(u)] dz ds \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s [L^1 f(y(t_0)) + \int_{t_0}^z L^0 L^1 f(y(u)) du + \int_{t_0}^z L^1 L^1 f(y(u)) \circ dW(u)] \circ dW(z) ds \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s [L^0 g(y(t_0)) + \int_{t_0}^z L^0 L^0 g(y(u)) du + \int_{t_0}^z L^1 L^0 g(y(u)) \circ dW(u)] dz \circ dW(s) \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s [L^1 g(y(t_0)) + \int_{t_0}^z L^0 L^1 g(y(u)) du + \int_{t_0}^z L^1 L^1 g(y(u)) \circ dW(u)] \circ dW(z) \circ dW(s) \\
 &= y(t_0) + f(y(t_0)) \int_{t_0}^t ds + g(y(t_0)) \int_{t_0}^t \circ dW(s) \\
 &+ L^0 f(y(t_0)) \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s dz ds + L^1 f(y(t_0)) \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \circ dW(z) ds \\
 &+ L^0 g(y(t_0)) \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s dz \circ dW(s) + L^1 g(y(t_0)) \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \circ dW(z) \circ dW(s) \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^0 L^0 f(y(u)) du dz ds + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^1 L^0 f(y(u)) \circ dW(u) dz ds \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^0 L^1 f(y(u)) du \circ dW(z) ds + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^1 L^1 f(y(u)) \circ dW(u) \circ dW(z) ds \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^0 L^0 g(y(u)) du dz \circ dW(s) + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^1 L^0 g(y(u)) \circ dW(u) dz \circ dW(s) \\
 &+ \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^0 L^1 g(y(u)) du \circ dW(z) \circ dW(s) + \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s \int_{t_0}^z L^1 L^1 g(y(u)) \circ dW(u) \circ dW(z) \circ dW(s) .
 \end{aligned}$$

同理, 将被积函数 $L^0 L^0 f(y(u))$, $L^1 L^0 f(y(u))$, $L^1 L^0 f(y(u))$, $L^1 L^1 f(y(u))$ 以及

$L^0 L^0 g(y(u))$, $L^1 L^0 g(y(u))$, $L^1 L^0 g(y(u))$, $L^1 L^1 g(y(u))$ 替换, 即可展开到对应的三重 Stratonovich 积分。我们以 J 表示 Stratonovich 积分, 并定义 $J_0 = \int_{t_0}^t ds$ 表示对时间的积分, $J_1 = \int_{t_0}^t \circ dW(s)$ 表示对 Wiener 过程的积分。因此最终有

$$\begin{aligned} y(t) = & y(t_0) + f(y(t_0))J_0 + g(y(t_0))J_1 + L^0 f(y(t_0))J_{00} + L^1 f(y(t_0))J_{10} \\ & + L^0 f(y(t_0))J_{01} + L^1 g(y(t_0))J_{11} + L^0 L^0 f(y(t_0))J_{000} + L^1 L^0 f(y(t_0))J_{100} \\ & + L^0 L^1 f(y(t_0))J_{010} + L^1 L^1 f(y(t_0))J_{110} + L^0 L^0 g(y(t_0))J_{001} + L^1 L^0 g(y(t_0))J_{101} \\ & + L^0 L^1 g(y(t_0))J_{011} + L^1 L^1 g(y(t_0))J_{111} + R. \end{aligned} \quad (A.7)$$

其中 R 表示剩下的更高阶的项。随机微分方程系数的高阶导数可以进一步展开得

$$L^0 f = f' f, \quad (A.8)$$

$$L^0 L^0 f = L^0(f' f) = (f' f)' f = f''(f, f) + f' f' f, \quad (A.9)$$

其中 f' 和 f'' 分别表示线性和双线性算符, 写成分量形式为

$$(f'(f))^i = f_j^i f^j, \quad (A.10)$$

$$(f''(f, f))^i = f_{jk}^i f^j f^k = \sum_{j,k=1}^m \frac{\partial^2 f^i}{\partial x_j \partial x_k} f^j f^k. \quad (A.11)$$

因此令 $y_0 = y(t_0)$, 方程 (A.7) 有

$$\begin{aligned} y(t) = & y_0 + f(y_0)J_0 + g(y_0)J_1 + f'(y_0)(f(y_0))J_{00} + f'(y_0)(g(y_0))J_{10} \\ & + f'(y_0)(f(y_0))J_{01} + g'(y_0)(g(y_0))J_{11} + f''(y_0)(f(y_0), f(y_0))J_{000} \\ & + f'(y_0)(f'(y_0)(f(y_0)))J_{000} + f''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{100} + f'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{100} \\ & + f''(y_0)(g(y_0), f(y_0))J_{010} + f'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{010} \\ & + g''(y_0)(g(y_0), y(t_0))J_{110} + g'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{110} \\ & + f''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{001} + f'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{001} \\ & + g''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{010} + g'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{010} \\ & + f''(y_0)(g(y_0), g(y_0))J_{011} + f'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{011} \\ & + g''(g(y_0), g(y_0))J_{111} + g'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{111} + R. \end{aligned} \quad (A.12)$$

由此我们可以看到, 如果要构造高阶随机 Runge-Kutta 方法, 在展开随机微分方程的解析解和数值解过程中, 使复杂度提升的主要是 Stratonovich 的多重积分和随机微分方程系数的高阶导数的求解。为了简化随机微分方程的随机 Taylor 展开, 类比与确定性 Runge-Kutta 方法对应的有根树理论, 可以采用多色有根树理论。

A.2 Stratonovich 多重积分的 Mathematica 计算

计算随机多重积分乘积的期望在构造随机微分方程数值算法的过程中是十分必要的。随机多重积分乘积的迭代关系能够使我们将多重积分的乘积表达成相同的类型随机积分的线性组合^[123]。因此，我们可以通过简单的随机积分的值来得到复杂的随机多重积分乘积的值。根据随机多重积分乘积的迭代关系，我们可以构造相应的 Mathematica 程序。通过这种方式一方面加深对 Stratonovich 多重积分乘积的理解，另一方面方便对随机微分方程数值方法的构造。下面我们介绍构造随机多重积分乘积的引理，主要是针对 Itô 积分，而 Stratonovich 多重积分乘积可以通过 Itô 多重积分和 Stratonovich 多重积分的关系来得到。

引理 A.2 如果 $j, j_1, \dots, j_l \in \{0, 1, \dots, m\}$ 那么

$$I_{(j)} I_{(j_1, \dots, j_l)} = \sum_{i=0}^l I_{(j_1, \dots, j_i, j, j_{i+1}, \dots, j_l)} + \sum_{i=1}^l \chi_{\{j_i=j \neq 0\}} I_{(j_1, \dots, j_{i-1}, 0, j_{i+1}, \dots, j_l)}, \quad (\text{A.13})$$

其中 χ_A 表示集合 A 的指标函数。

根据引理A.2我们可以计算两个 Itô 积分的乘积，其中方程左边第一项中第一个为单次积分，第二个为多重积分。例如计算 $I_1 I_{(0,1,1)}$ ，根据引理内容，我们可以得到

$$\begin{aligned} I_1 I_{(0,1,1)} &= I_{(1,0,1,1)} + I_{(0,1,1,1)} + I_{(0,1,1,1)} + I_{(0,1,1,1)} + I_{(0,0,1)} + I_{(0,1,0)} \\ &= I_{(0,0,1)} + I_{(0,1,0)} + 3I_{(0,1,1,1)} + I_{(1,0,1,1)}. \end{aligned}$$

而要计算两个多重积分的乘积则需要根据如下引理

引理 A.3 如果 $\alpha = (j_1, \dots, j_l)$ 和 $\beta = (j'_1, \dots, j'_p)$ ，其中 $j_i, j'_k \in \{0, 1, \dots, m\}$ ，那么对于 $t \geq 0$ ，有

$$I_{\alpha,t} I_{\beta,t} = \int_0^t I_{\alpha,s} I_{\beta-,s} dW_s^{j'_p} + \int_0^t I_{\alpha-,s} I_{\beta,s} dW_s^{j_l} + \int_0^t I_{\alpha-,s} I_{\beta-,s} \chi_{\{j_l=j'_p \neq 0\}} ds.$$

例如计算 $I_{(0,0)} I_{(0,2)}$ ，根据引理A.3有

$$\begin{aligned} I_{(0,0)} I_{(0,2)} &= \int_0^t I_{(0,0)} I_0 dW_s^2 + \int_0^t I_0 I_{(0,2)} dW_s^0 \\ &= \int_0^t 3I_{(0,0,0)} dW_s^2 + \int_0^t (2I_{(0,0,2)} + I_{(0,2,0)}) dW_s^0 \\ &= 3I_{(0,0,0,2)} + 2I_{(0,0,2,0)} + I_{(0,2,0,0)}. \end{aligned}$$

如果要计算随机多重积分乘积的期望,也可以从 Itô 积分的期望出发,根据 Itô 积分鞅的性质,对长度为 l 的 α 有

$$E[I_\alpha] = \begin{cases} \frac{h^l}{l!} & \text{if } \alpha = (0, 0, \dots, 0) \\ 0 & \text{in other case,} \end{cases}$$

如果要求 Stratonovich 多重积分的乘积,我们可以先根据 Stratonovich 多重积分与 Itô 多重积分的关系,将 Stratonovich 多重积分化为 Itô 多重积分,然后再根据 Itô 多重积分的乘积进行求解。Stratonovich 多重积分与 Itô 多重积分的关系如下引理

引理 A.4 对于多重指标 α 的长度 $l = 0$ 或者 $l = 1$ 时,有 $J_\alpha = I_\alpha$, 而对于 $l \geq 2$ 时,有

$$J_\alpha = \int_0^t J_{\alpha-} dW_s^{j_l} + \frac{1}{2} \chi_{\{j_l=j_{l-1} \neq 0\}} \int_0^t J_{(\alpha-)} ds.$$

例如计算 $J_{(1,1,1)}$, 根据引理 A.4, 我们有

$$\begin{aligned} J_{(1,1,1)} &= \int_0^t J_{(1,1)} dW_s^1 + \frac{1}{2} \int_0^t J_1 ds \\ &= \int_0^t \left(\int_0^t J_1 dW_s^1 + \frac{1}{2} J_0 \right) dW_s^1 + \frac{1}{2} \int_0^t J_1 ds \\ &= I_{(1,1,1)} + \frac{1}{2} I_{(0,1)} + \frac{1}{2} I_{(1,0)}. \end{aligned}$$

相应的 Mathematica 程序可以参考^[123]。

A.3 随机 Runge-Kutta 方法的双色有根树理论

类比于确定系统 Runge-Kutta 方法构造过程中用于简化 Taylor 展开的有根树理论,简化随机 Taylor 展开可以采用多色有根树理论,即用多种颜色来表示不同的 Wiener 过程。当只有一个 Wiener 过程时,则有双色有根树理论。双色有根树的基本思路是采用树 t 的直观表示,结合一定的规则,可以直接表示出该树对应的 Taylor 展开项中系数高阶导数的表达式以及相应多重积分的表达式。因此,只要将规则讲清楚,这些规则是规定了树,树图,系数高阶导以及多重积分的关系,而树图,系数高阶导以及多重积分都可以以树为标准进行读出。理清这些关系,就可以采用树或者树图的方式来简化随机 Taylor 展开式。

其规则是这样的:首先阐述树和树图的关系,树根为 t , 当 $t = \tau$ 时表示为确定节点,在树图中用 $\bullet$ 表示,当 $t = \sigma$ 时表示随机节点,在树图中用 $\circ$ 表示。如

果 $t_1, \dots, t_m$ 为双色树, $[t_1, \dots, t_m]$ 和 $\{t_1, \dots, t_m\}$ 分别表示用 $\bullet$ 和 $\circ$ 连接这些树。树与树图的对应为树从外往里对应树图从上往下, 树从左往右对应树图从左往右。例如, $t_1 = [\sigma]$, $t_2 = \sigma$, 那么树 $[t_1, t_2] = [[\sigma], \sigma]$ 从外往里, 将最外层的 $[]$ 看成根, 对应的是 $\bullet$, 然后由 $[]$ 连接两个树 $[\sigma]$ 和 σ , 第二个树即为 $\circ$, 而第一个树也是从外往里, 先为 $\bullet$, 然后由 $[]$ 在连接一个 σ , 即 $\circ$, 则有树图 A.1。

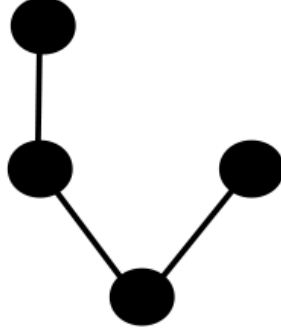


图 A.1 树 $[[\sigma], \sigma]$

然后阐述树和高阶导数的关系, 节点 τ 对应于 $f(y_0)$, σ 对应 $g(y_0)$, $[t_1, \dots, t_m]$ 和 $\{t_1, \dots, t_m\}$ 分别表示 $f'''(y_0)(t_1, \dots, t_m)$ 和 $g'''(y_0)(t_1, \dots, t_m)$, 即为 $f(y_0)$ 和 $g(y_0)$ 的多线性映射。树从外往里对应高阶导数的从外往里, 树的从左往右对应高阶导数的从左往右。同样以 $[[\sigma], \sigma]$ 为例, 则有

$$[[\sigma], \sigma] \mapsto f''(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)), g(y_0)) .$$

最后阐述树与多重积分的关系, 节点 τ 对应于对时间的积分, 用 0 表示, σ 对应于对随机过程的积分, 用 1 表示。 $[]$ 和 $\{\}$ 分别表示对时间和随机过程的积分。树从外往里读, 从左往右读, 积分从右往左写。同样以 $[[\sigma], \sigma]$ 为例, 则有

$$[[\sigma], \sigma] \mapsto J_{1100} .$$

$$\begin{aligned}
 y(t) = & y_0 + f(y_0)J_0 + g(y_0)J_1 + f'(y_0)(f(y_0))J_{00} + f'(y_0)(g(y_0))J_{10} \\
 & + f''(y_0)(f(y_0))J_{01} + g'(y_0)(g(y_0))J_{11} + f''(y_0)(f(y_0), f(y_0))J_{000} \\
 & + f'(y_0)(f'(y_0)(f(y_0)))J_{000} + f''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{100} + f'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{100} \\
 & + f''(y_0)(g(y_0), f(y_0))J_{010} + f'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{010} \\
 & + g''(y_0)(g(y_0), y(t_0))J_{110} + g'(y_0)(g'(y_0)(f(y_0)))J_{110} \\
 & + f''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{001} + f'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{001} \\
 & + g''(y_0)(f(y_0), g(y_0))J_{010} + g'(y_0)(f'(y_0)(g(y_0)))J_{010} \\
 & + f''(y_0)(g(y_0), g(y_0))J_{011} + f'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{011} \\
 & + g''(y_0)(g(y_0), g(y_0))J_{111} + g'(y_0)(g'(y_0)(g(y_0)))J_{111} + R.
 \end{aligned} \tag{A.14}$$

根据这些规定, 我们可以将方程 (A.12) 表示成

$$\begin{aligned}
 y(t) = & \phi + \tau + \sigma + [\tau] + [\sigma] + \{\tau\} + \{\sigma\} + [\tau, \tau] \\
 & + [[\tau]] + [\tau, \sigma] + [[\sigma]] + [\sigma, \tau] + [\{\tau\}] + \{\sigma, \tau\} \\
 & + \{\{\tau\}\} + [\tau, \sigma] + [[\sigma]] + \{\tau, \sigma\} + \{\{\sigma\}\} \\
 & + [\sigma, \sigma] + [\{\sigma\}] + \{\sigma, \sigma\} + \{\{\sigma\}\} + R.
 \end{aligned}$$

A.4 强 1.5 阶随机 Runge-Kutta 算法

通过比较随机微分方程解析解和随机 Runge-Kutta 方法 Taylor 展开的式子, 我们可以得到随机 Runge-Kutta 方法的阶条件。相反的, 根据阶条件所规定的微分方程的解析解和数值解的关系, 我们可以确定随机 Runge-Kutta 方法的系数。下面介绍 3 种随机 Runge-Kutta 方法, 将这三种算法应用与 Black Schdule 问题中, 得到相应的收敛性阶数, 并与 Itô 形式的 Euler-Maruyama 算法, Stratonovich 形式的 Euler-Maruyama 算法进行对比。

CL

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \alpha^T = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}\right), \tag{A.15}$$

$$B^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0.7242916356 & 0 & 0 & 0 \\ 0.4237353406 & -0.1994437050 & 0 & 0 \\ -1.57845506 & 0.840100343 & 1.738375163 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

$$B^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2.702000410 & 0 & 0 & 0 \\ 1.757261649 & 0 & 0 & 0 \\ -2.918524118 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

$$\gamma^{(1)T} = (-0.7800788474, 0.07363768240, 1.486520013, 0.2199211524), \quad (\text{A.18})$$

$$\gamma^{(2)T} = (1.693950844, 1.636107882, -3.024009558, -0.3060491602). \quad (\text{A.19})$$

对于表达式为

$$dy(t) = f(y(t))dt + g(y(t)) \circ dW(t), \quad (\text{A.20})$$

的 Stratonovich SDE, 其 Runge-Kutta 方法表达式为

$$Y_i = y_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} f(Y_j) + \sum_{j=1}^{i-1} (b_{ij}^{(1)} J_1 + b_{ij}^{(2)} \frac{J_{10}}{h}) g(Y_j), \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad (\text{A.21})$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s \alpha_j f(Y_j) + \sum_{j=1}^s (\gamma_j^{(1)} J_1 + \gamma_j^{(2)} \frac{J_{10}}{h}) g(Y_j). \quad (\text{A.22})$$

J_{10} 是由 J_1 累计计算而得的, 因此, 对于时间步为 h , $g_1 \sim N(0, 1)$, $g_2 \sim N(0, 1)$ 时, 有

$$\begin{aligned} J_1 &= \sqrt{h} g_1, \quad g_1 \sim N(0, 1), \\ \frac{J_{10}}{h} &= \frac{\sqrt{h}}{2} (g_1 + \frac{g_2}{\sqrt{3}}), \quad g_1 \sim N(0, 1), g_2 \sim N(0, 1). \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

除了 CL 算法具有强 1.5 阶外, 还有两个强 1.5 阶的算法 E1, E2, 这两个算法的系数矩阵和参数分别为

E1

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 \\ \frac{7}{6} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha^T = (\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, -\frac{3}{4}, \frac{3}{4}), \quad (\text{A.24})$$

$$B^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.25})$$

$$B^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{6} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.26})$$

$$\gamma^{(1)T} = \left(-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right), \quad (\text{A.27})$$

$$\gamma^{(2)T} = \left(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, 0, 0\right). \quad (\text{A.28})$$

E2

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{5}{12} & -\frac{3}{4} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{4} & \frac{31}{12} & -\frac{4}{3} & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha^T = \left(\frac{3}{8}, \frac{5}{8}, -\frac{1}{16}, \frac{1}{16}\right), \quad (\text{A.29})$$

$$B^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 5.72561792 & -2.05895125 & 0 & 0 \\ -7.12662744 & 4.61231160 & -0.48568416 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.30})$$

$$B^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -8 & 0 & 0 & 0 \\ 13.82820986 & -5.82820986 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.31})$$

$$\gamma^{(1)T} = (-0.7800788474, 0.07363768240, 1.486520013, 0.2199211524), \quad (\text{A.32})$$

$$\gamma^{(2)T} = (1.693950844, 1.636107882, -3.024009558, -0.3060491602). \quad (\text{A.33})$$

数值算例 1

Itô SDE

$$dy = -(\alpha + \beta^2 y)(1 - y^2)dt + \beta(1 - y^2)dW, \quad y(0) = y_0, \quad t \in [0, 1], \quad (\text{A.34})$$

其对应的 Strotonovich SDE 为

$$dy = -\alpha(1 - y^2)dt + \beta(1 - y^2) \circ dW. \quad (\text{A.35})$$

其解析表达式为

$$y(t) = \frac{(1 + y_0) \exp(-2\alpha t + 2\beta W(t)) + y_0 - 1}{(1 + y_0) \exp(-2\alpha t + 2\beta W(t)) + 1 - y_0}. \quad (\text{A.36})$$

因此有

$$f(y) = -\alpha(1 - y^2), \quad g(y) = \beta(1 - y^2). \quad (\text{A.37})$$

将方程 (A.15)-(A.19) 带入 (A.21)-(A.22) 得

$$Y_1 = y_n,$$

$$Y_2 = y_n + ha_{21}f(Y_1) + (b_{21}^{(1)}J_1 + b_{21}^{(2)}\frac{J_{10}}{h})g(Y_1),$$

$$Y_3 = y_n + ha_{31}f(Y_1) + ha_{32}f(Y_2) + (b_{31}^{(1)}J_1 + b_{31}^{(2)}\frac{J_{10}}{h})g(Y_1) \\ + (b_{32}^{(1)}J_1 + b_{32}^{(2)}\frac{J_{10}}{h})g(Y_2),$$

$$Y_4 = y_n + ha_{41}f(Y_1) + ha_{42}f(Y_2) + ha_{43}f(Y_3) + \\ + (b_{41}^{(1)}J_1 + b_{41}^{(2)}\frac{J_{10}}{h})g(Y_1) + (b_{42}^{(1)}J_1 + b_{42}^{(2)}\frac{J_{10}}{h})g(Y_2) \\ + (b_{43}^{(1)}J_1 + b_{43}^{(2)}\frac{J_{10}}{h})g(Y_3),$$

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=1}^s \alpha_j f(Y_j) + \sum_{j=1}^s (\gamma_j^{(1)}J_1 + \gamma_j^{(2)}\frac{J_{10}}{h})g(Y_j).$$

所得结果如图A.2

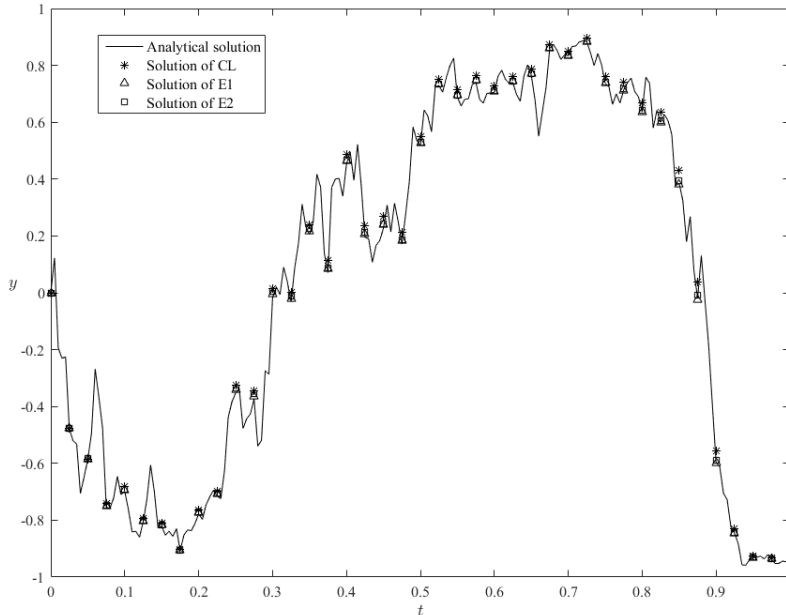


图 A.2 解析解与 1.5 强阶随机 Runge-Kutta 数值解

解析解与数值解的误差如图A.3

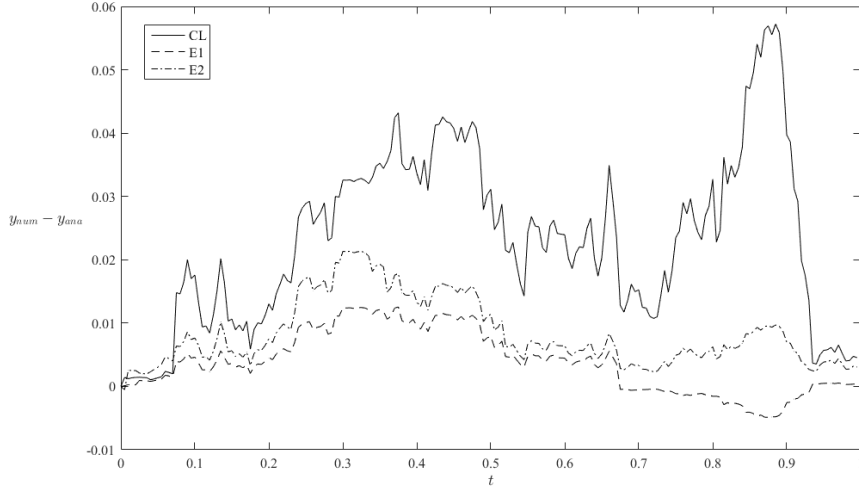


图 A.3 1.5 强阶随机 Runge-Kutta 数值算法与解析解的误差

数值算例 2

随机微分方程的一般形式为

$$dX(t) = f(X(t))dt + g(X(t))dW(t), X(0) = X_0, 0 \leq t \leq T. \quad (\text{A.38})$$

Black-Scholes 的基本方程为^[24]

$$dX(t) = \lambda X(t)dt + \mu X(t)dW(t), X(0) = X_0 \quad (\text{A.39})$$

其中 λ 和 μ 都是实常数；该方程的解析解为^[25]

$$X(t) = X(0) \exp\left((\lambda - \frac{1}{2}\mu^2)t + \mu W(t)\right). \quad (\text{A.40})$$

根据 Itô 积分与 Stratonovich 积分之间的关系，可以得到与 Itô SDE 具有等价关系的 Stratonovich SDE，对应于方程 (2)，其 Stratonovich SDE 形式为

$$dX(t) = [\lambda X(t) - \frac{1}{2}\mu^2 X(t)]dt + \mu X(t) \circ dW(t), X(0) = X_0, \quad (\text{A.41})$$

取 $\lambda = 2, \mu = 1, X_0 = 1, \Delta t = 1/5000, T = 5000$ ，按照方程 (3) 可以得到解析解 X_{ture} ，利用方程 (5),(6) 可以分别得到 Itô SDE 和 Stratonovich SDE 在 Euler-Maruyama 数值方法下的数值解。取收敛性比较的时刻为最后一个时间步，即 $t = T$ ，取 1000 个不同的 Wiener 过程来驱动同一随机微分方程所对应的随机过程，根据强收敛的定义得到收敛性的阶数。采用两种数值格式所得收敛性结果如图 3 所示。图中的红色虚线为时间间隔 Δt 的 $\frac{1}{2}$ 阶，蓝色虚线为时间间隔 Δt 的 1 阶，所取的时间间隔分别为 $\delta t, 2\delta t, 4\delta t, 8\delta t$ ，当时间间隔越小时，两种格式的算法的收敛性都越好。

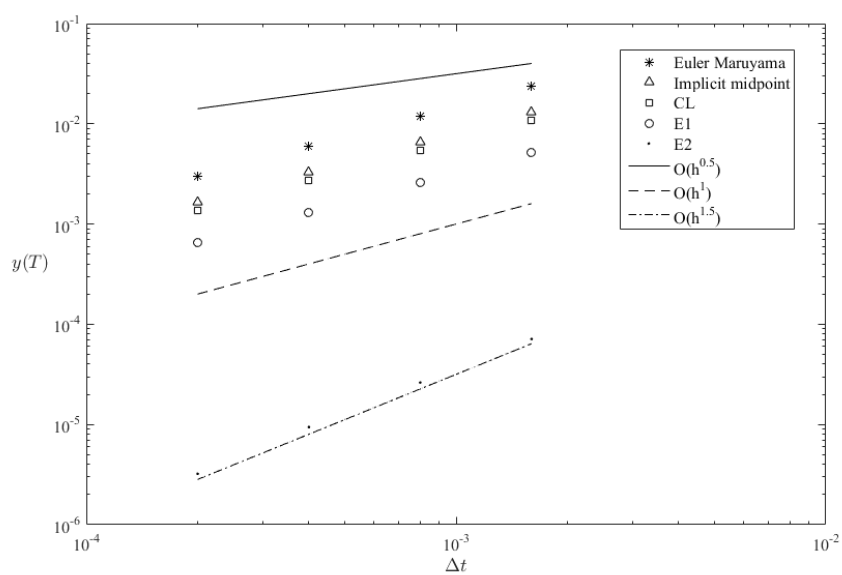


图 A.4 强 1.5 阶随机 Runge-Kutta 算法收敛性

致 谢

对等离子体碰撞算法的探索是一个有趣的过程，而将保结构算法和等离子体碰撞联系起来更像是一门发展中的艺术。真正能够将复杂等离子体物理变成能够计算而且计算精确的算法和程序，是一项有趣而重要的工作。

在研究学习期间，首先我要感谢我的导师庄革教授，感谢他给了我研究的平台和机会，也给我足够的信任和支持，让我能够做自己感兴趣的研究。庄老师治学严谨，他让我明白做科研需要有明确的目标，需要大胆假设，小心求证。

我要感谢秦宏教授，感谢他教授我老鼠啃天的思想，以点带面的思维。他对问题关键的把握，实事求是，客观公正的态度也时常影响着我。我要感谢他是我明白在科研过程中应该以兴趣作为动力，以问题作为指引，并且时刻保持一颗对自己负责任的心。科研过程中他给我很多启发，也鼓励我不断探索。

我要感谢刘健副教授，感谢他对我眼界的开拓的帮助，感谢他在科研思维方法、工作思路方面的指点。也感谢他一直以来的关心和照顾。是他让我明白活学活用的重要性，使我摆脱了以往的一些固有思维。是他让我明白如果要对一个科研问题有所认识，提出不断深入的问题，才是正确的途径。

我要感谢师兄肖建元副研究员，感谢他一直以来对我的帮助，在 Linux 操作系统的认识和编程知识的方面他给了我很多启发。在科研工作方面他带着我参加过多个会议比赛，讨论课题的进展，在论文的探讨与修改方面帮了我很多。感谢他给我的计算提供了计算资源，否则课题是无法完成的。在此对他表示十分的感激。他一直是学习的榜样。

我要感谢师兄王雨雷博士，在研究工作和论文写作过程中他都给了十分重要的帮助和信任。他十分耐心的和我探讨问题，课题的进展，对我课题工作的推进起着举足轻重的作用，在这里十分感谢他。

我要感谢郑江山，感谢他一直以来的陪伴，感谢他一直以来真诚的陪伴与信任，他对事物的看法和处理事务的技巧都十分独特，我在其中也受益良多。在他身上的探究精神是值得我学习的。

我要感谢郝保龙博士，在快离子损失的研究中为我提供了 EAST 平衡数据与 NUBEAM 快离子初始分布数据，让我看到程序计算的技术路径。我要感谢蔡辉山教授，他是我等离子体基础的授课老师，他告诉我在做科研的时候要对自己所做课题的坚定。感谢郑坚教授，感谢他给我的鼓励。感谢大连理工的赵瑞同学，为我提供了很多快离子研究方面的文献。感谢石生字同学，给我介绍 EFIT 程序和相关文献。

我要感谢师兄范培锋博士，他在研究工作中对于一些数学知识的传授，他对

科研的执着也时常影响着我，感谢他为我介绍工作。感谢王彦鹏师兄，在和他的讨论中学习到了很多。感谢武文涛师兄在研究课题细致的介绍和引导。感谢课题组的师姐张瑞丽博士，何洋博士和兰婷博士，她们让我看到了科研生活该有的样子。我要感谢王小亮，王朝晖，他们时常和我探讨科研，论文写作，文献调研以及期刊相关的问题，这对论文的完成工作很有帮助。感谢课题组的李传冰，郑冠男，吴小莉，陈俊杰，张凯，朱玉，舒裕康，王思琪和赵子博，十分荣幸能够和他们一起科研。计算物理所的李英哲在我对保结构算法的理解上也给了很多帮助，所以也十分地感谢他。感谢我的舍友张振弛，感谢他对我生活上的帮助。

我要感谢我的朋友褚伟伟，感谢他的真诚相待，感谢与他一起度过的快乐时光。

我要感谢课题组的教学秘书孙丽娟老师，系教学秘书王玮老师，贺明杨老师，李雯老师，感谢她们对毕业工作过程中的帮助。

最后我要感谢我的父母兄嫂，他们给了我幸福的家庭，感谢他们一直以来默默的支持，感谢他们耐心的陪伴和持续不断的鼓励，感谢他们一直以来的关怀，让我能够潜心做科研。感谢我的女友郑奕婷，感谢她对我的关心和支持，感谢她对我的理解和宽容，感谢她对我的陪伴。

在读期间发表的学术论文与取得的研究成果

已发表论文

1. **郑艺峰**, 王雨雷, 刘健, 秦宏. ISSDE: 基于第一性原理随机微分方程的碰撞等
离子体隐式模拟 [J]. 计算物理, 2019, 36(03): 265-279.
2. 吴小莉, **郑艺峰**. 基于 K 近邻算法的噪声种类识别和强度估计 [J]. 计算机应
用, 2020, 40(01): 264-270.
3. **Yifeng Zheng**, Jianyuan Xiao, Yanpeng Wang, Jiangshan Zheng, and Ge Zhuang,
ISSDE: A Monte Carlo implicit simulation code based on Stratonovich SDE ap-
proach of Coulomb collision. Chinese Physics B, 2021, 9, 095201
4. Jiangshan Zheng, Guanghui Zhu, Junshi Chen, **Yifeng Zheng**, Jianyuan Xiao,
Xuan Sun, Ge Zhuang, Hong An, Dexun Chen, Xin Liu, and Fang Li, Structure-
preserving particle-in-cell simulation of lower hybrid wave propagation and heat-
ing in the magnetic mirror, Nuclear Fusion, 2021, 126028

待发表论文

1. **Yifeng Zheng**, Jianyuan Xiao, Baolong Hao, Liqing Xu, Yanpeng Wang, Jiang-
shan Zheng, and Ge Zhuang, Modeling of beam ions and slowing down with
Coulomb collision in EAST, Chinese Physics B, 212757(接收)