

О ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ИЗМЕРЕНИЙ  
КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Д. И. Гудзенко, Т. С. Терентьева, В. Е. Чертопруд

УДК 518.12; 539.186

Обсуждаются вопросы моделирования корреляционной методики измерения кинетических коэффициентов. Оценки указывают на осуществимость моделируемых экспериментов в лабораторных условиях.

При довольно общих условиях измерения вероятностей столкновительных переходов атомов (молекул, ионов) в низкотемпературной плазме сводятся к оценкам коэффициентов линейных кинетических уравнений для заселенностей атомных уровней. Пренебрегая флуктуациями заселенностей, напишем:

$$\frac{dN_i}{dt}(t) = \sum_{j \neq i, j=1}^J K_{ij}N_j(t) - K_{ii}N_i(t) + N_i; \quad i = 1, 2, \dots, J. \quad (I)$$

Здесь  $N_i(t) \equiv \frac{1}{\theta} \int_{t-\theta}^t n_i(\tau) d\tau$ ,  $n_i(t)$  - истинная (мгновенная) заселенность  $i$ -го уровня;  $\theta$  - определяемый постоянной времени аппаратуры интервал сглаживания, который должен быть малым по сравнению с характерными временами динамической системы (I),  $K_{ij}$  - кинетические коэффициенты,  $K_{ii} = \sum_{j \neq i, j=0}^J K_{ji}$ ,  $N_i$  - интенсивность на-

полнения уровня ( $i$ ) с уровней, не включенных в последовательность  $j = 1, 2, \dots, J$ . . Параметры уравнений (I) - вероятности переходов, включая и вероятности разыскиваемых безызлучательных переходов. Как показано в [1], уравнения для флуктуаций заселенностей  $\eta_i \equiv N_i - \langle N_i \rangle$  имеют вид:

$$\frac{d\eta_i}{dt}(t) + K_{i1}\eta_i(t) = \sum_{j \neq i, j=1}^J K_{ij}\eta_j(t) + q_i\Phi_i(t); \quad i = 1, 2, \dots, J; \quad (2)$$

$$q_i = \sqrt{\frac{2}{\Theta} K_{i1} \langle N_i \rangle}; \quad \langle \Phi_i(t) \rangle \equiv 0; \quad \sigma^2 \Phi_i(t) \equiv 1; \quad \langle \Phi_i(t) \Phi_j(t) \rangle = \\ = -\frac{K_{i1} \langle N_i \rangle + K_{j1} \langle N_j \rangle}{2\sqrt{K_{i1} K_{j1} \langle N_i \rangle \langle N_j \rangle}}, \quad j \neq i; \quad \langle \Phi_i(t) \Phi_j(t + \tau) \rangle \approx 0 \quad |\tau| \gg \Theta, \quad (3)$$

а корреляционные функции  $\rho_{ij}^{\eta}(\tau) \equiv \langle \eta_i(t) \eta_j(t + \tau) \rangle / \sigma \eta_i \sigma \eta_j$  подчиняются уравнениям:

$$\frac{d}{d\tau} \rho_{ij}^{\eta}(\tau) + K_{jj} \rho_{ij}^{\eta}(\tau) = \sum_{s \neq j, s=1}^J \frac{\sigma \eta_s}{\sigma \eta_j} K_{js} \rho_{is}^{\eta}(\tau). \quad (4)$$

Эти функции содержат полную информацию о кинетической матрице  $\|K_{ij}\|$ , но заселенности  $N_i(t)$  непосредственно аппаратурой не регистрируются. Их значения проявляются в измеряемом фотоприемником числе  $n_{k,i}$  фотонов, спонтанно излученных объектом в течение малого интервала времени  $(t - \Theta, t)$  при радиационных переходах  $i \rightarrow k$  атомов с уровня  $i$  на более низкий уровень  $k$  ( $E_k < E_i$ ). Наблюдаемые таким косвенным образом флуктуации заселенностей  $\mu_i$  представимы в виде суммы

$$\mu_i(t) = \eta_i(t) + \xi_i(t), \quad \langle \xi_i(t) \rangle \equiv 0, \quad \langle \xi_i(t) \xi_i(t + \tau) \rangle = 0 \\ \text{при } |\tau| \gg \Theta \quad (5)$$

двух независимых стационарных случайных процессов: внутренних флуктуаций  $\eta_i(t)$  и аддитивного шума  $\xi_i(t)$ . В оптимальных условиях эксперимента отношение дисперсий  $\alpha_i \equiv \frac{\sigma^2 \xi_i}{\sigma^2 \eta_i} \sim 10^3$ . Корреляционные функции  $\rho_{ij}^{\mu}(\tau) \equiv \langle \mu_i(t) \mu_j(t + \tau) \rangle / \sigma \mu_i \sigma \mu_j$  наблюдаемого сигнала подчиняются уравнениям:

$$\frac{d}{d\tau} \rho_{ij}^{\mu}(\tau) + K_{jj} \rho_{ij}^{\mu}(\tau) = \sum_{s \neq j, s=1}^J \frac{\sigma \mu_s}{\sigma \mu_j} K_{js} \rho_{is}^{\mu}(\tau); \quad i, j = 1, 2, \dots, J, \quad (6)$$

где индекс "μ" для краткости опущен. Система (6) позволяет находить матрицу  $\|K_{ij}\|$  по корреляционной матрице  $\|p_{ij}\|$ . С производными  $\frac{dp_{ij}}{d\tau}$  ( $\tau$ ) иметь дело нежелательно, так как для их оценок по выборочным корреляционным функциям  $r_{ij}(\tau)$  характерен сильный разброс. Проще всего избавиться от них, интегрируя уравнение (6) и переходя к системе:

$$\rho_{ij}(\tau_2) - \rho_{ij}(\tau_1) = -K_{jj} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \rho_{ij}(\tau) d\tau + \sum_{s \neq j, s=1}^J K_{js} \frac{\partial \mu_s}{\partial \mu_j} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \rho_{js}(\tau) d\tau. \quad (7)$$

Выбор пределов интегрирования  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , оптимальных для оценок коэффициентов  $K_{ij}$ , определяется видом корреляционных функций  $\rho_{ij}(\tau)$ . Описанная процедура нахождения коэффициентов сводится к регистрации сигнала  $\mu_i(t)$ , ( $i = 1, 2, \dots, J$ ), оценкам  $r_{ij}(\tau)$  корреляционных функций, вычислению интегралов  $\int_{\tau_1}^{\tau_2} r_{is}(\tau) d\tau$  и решению

линейной системы (7).

До организации физических измерений желательно провести вспомогательные исследования, результатом которых должно быть отыскание оптимальных параметров плазмы, определение нужного количества каналов регистрации чисел фотонов, уточнение длительности измерений. Решая кинетические уравнения для сигнала, моделируя в их правых частях внутренние флуктуации, а также - аддитивные шумы, можно предсказать точность оценок кинетических коэффициентов при довольно большом числе  $J$  регистрируемых состояний. Варьируя в числовых экспериментах количество регистрируемых состояний, вид матрицы  $\|k_{ij}\|$ , концентрацию и температуру свободных электронов плазмы, времена сглаживания и регистрации, можно находить оптимальные условия для оценки (или уточнения) коэффициентов  $K_{ij}$ . Расчеты на ЭВМ провести проще, чем физические эксперименты по оценке этих коэффициентов. Более того,

поскольку в реальных условиях отношения дисперсий  $\alpha_1 \equiv \sigma^2 \xi_1 / \sigma^2 \eta_1$  очень велики, а все корреляционные функции фотосчетов по абсолютной величине меньше  $1/\alpha_1 \ll 1$ , при переходе к математическому эксперименту можно уменьшить  $\alpha_1$  в  $Q$  раз (при условии, что  $\alpha_1 \equiv \alpha_1/Q > 1$ ). Получаемая в таком математическом моделировании при длительности измерений  $T$  точность оценок параметров достигается в реальном физическом эксперименте при  $T = T' [(1 + \alpha_1) / (1 + \alpha_1') ]^2$ . Численное моделирование включает по существу две задачи: 1) имитацию сигнала  $\mu_1(t)$ , соответствующего условиям предстоящего физического эксперимента (т.е. при заданных  $\|K_{1,j}\|$ ,  $\langle N_1 \rangle$ ,  $\alpha_1, \theta$  и т.д.), 2) проведение обработки сигнала  $\mu_1(t)$  по схеме эксперимента, получение серии оценок  $\|\hat{K}_{1,j}\|$ , определение их точности и времени физических измерений, при котором достигается эта точность.

Рассматривалась система с тремя выделенными уровнями. Для определенности параметры задачи были взяты для плазмы атомарного водорода с регистрируемыми уровнями  $n = 4, 5, 6$  при  $N_0 = 7 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$  и  $T_0 = 0,7 \text{ эВ}$ . В качестве масштаба времени выбран шаг вычислений  $\theta = 10^{-9}$  сек. В этой системе единиц

$$\|100K_{1,j}\| = \begin{pmatrix} 3,95 & 1,68 & 0,171 \\ 0,675 & 3,60 & 5,28 \\ 0,0014 & 1,28 & 9,58 \end{pmatrix},$$

$$(\lambda_1)^{-1} \approx -9, \quad (\lambda_2)^{-1} \approx -22, \quad (\lambda_3)^{-1} \approx -48,$$

где  $\lambda_j$  - корни характеристического уравнения системы (I). При моделировании случайных величин  $\Phi_1$  и  $\xi_1$  особое внимание уделялось их некоррелированности как внутри последовательностей, так и между последовательностями  $\{\Phi_1\}$  и  $\{\xi_1\}$ . Вычисления  $\eta_1(t)$  проводились с помощью разностной схемы первого порядка точности, аппроксимирующей производные первыми разностями:

$$\eta_1(t + \theta) = \eta_1(t) - K_{1,1}\theta\eta_1(t) + \theta \sum_{j \neq 1, j=1}^J K_{1,j}\eta_j(t) + a_1\theta\Phi_1(t). \quad (8)$$

Выбор столь грубой схемы обуславливается статистическим характером задачи, а именно тем, что в правой части (8) находятся ко-

ротко-коррелированные случайные функции  $\Phi_i(t)$ . В проводимом эксперименте регулярные ошибки в  $\hat{K}_{1j}$ , вызванные таким огрублением вычисления  $\eta_1(t)$ , много меньше стандартов случайных ошибок, связанных с конечным объемом выборки. Отношение дисперсий аддитивного шума и флуктуаций заселенностей брались равным  $\sigma_1^2 = 4$ , ( $i = 1, 2, 3$ ). Делалось  $g = 50$  независимых записей сигнала  $\mu_1(t)$  длительностью 5000  $\theta$  каждая. По каждой записи проводились оценки корреляционных функций  $r_{1j}^m(\tau)$  и матрицы  $\|\hat{K}_{1j}\|$  (всюду брались  $\tau_1 = \theta$ ,  $\tau_2 = 19\theta$ , а интегралы (7) вычислялись по 10 точкам с шагом  $2\theta$ ). Затем по  $g$  выборкам определялись средние коэффициенты  $\bar{K}_{1j}$  и их стандарты  $\sigma\bar{K}_{1j}$ . Общее время счета на БЭСМ-6 составило 16 минут. Коэффициенты  $K_{11}, K_{22}, K_{12}, K_{23}, K_{32}$  и  $K_{33}$  восстанавливались в среднем с точностью 20%; в качестве меры ошибки брались величины  $\beta_{1j} = |\bar{K}_{1j} - K_{1j}|/\bar{K}_{1j}$ , изменчивость  $U_{1j} = \sigma\bar{K}_{1j}/\bar{K}_{1j} \approx 30\%$ . Общее время соответствующего физического эксперимента при  $\sigma_1 = 2 \cdot 10^3$  составляет таким образом  $T_{1/3} \approx 5000 \times \theta \alpha [(\alpha+1)/(\alpha^2+1)]^2 = 40$  сек. Для уменьшения изменчивости оценок коэффициентов до 5% длительность эксперимента нужно увеличить примерно в 36 раз, т.е.  $T_{0,05} \approx 25$  мин, а длительность адекватного машинного эксперимента будет  $\approx 5$  часов. Обе величины, по-видимому, приемлемы.

Поступила в редакцию  
20 апреля 1976 г.

#### Л и т е р а т у р а

Г. Л. И. Гудзенко, В. Е. Чертопруд, С. И. Яковленко. Препринт  
ФИАН, № 13, 1974 г.