

用变分法解 Fokker-Planck 方程 计算核裂变几率*

钟云霄 胡济民

(北京大学技术物理系 北京 100871)

1992年11月30日收到

摘 要

发展了一种用变分法解 Fokker-Planck 方程的方法,计算了一维核裂变几率,研究了 F-P 方程与 Smoluchowski 方程的关系,为推导多维的质量系数和粘滞系数随形变参量变化并具有交叉项的 Smoluchowski 方程和解位能形式比较复杂的多维的 F-P 方程打下了基础。

关键词 变分法, Fokker-Planck 方程, 裂变几率。

1 引 言

用布朗运动模型研究核裂变问题,可以归结为解 Fokker-Planck (简称 F-P) 方程。很多作者^[1-4]都为此做了不少工作。但由于解 F-P 方程的困难,这些工作大都局限于一维并忽略了质量系数与粘滞系数随形变参量的变化。在以前的工作中^[5],我们曾用 Monte Carlo 方法直接解朗之万方程计算了质量系数与粘滞系数随形变参量变化的二维核裂变问题,并得到了裂变时的动能与质量分布。但这种方法过份依赖于形变的动力学行为,不但计算困难,而且结果也不见得可靠。在粘滞性比较大时,把速度分布看作接近平衡态的 Maxwell 分布,则 F-P 方程可以简化为 Smoluchowski (简称 Smo.) 方程。有些核裂变工作是解 Smo. 方程完成的^[6-8]。从 F-P 方程推导 Smo. 方程^[9,10],是在质量及粘滞系数均为常量时进行的。在多维的情况下,若质量系数与粘滞系数是形变参量的函数且存在着交叉项, Smo. 方程应如何获得? Smo. 方程比 F-P 方程究竟忽略了多少? 这些问题均有待于研究。本文用变分法解了一维的 F-P 方程,计算了与文献[1,4]中一样的模拟位能中的裂变几率,结果与文献[1]的数字解法以及文献[4]的 Monte Carlo 解法基本一致;并研究了 F-P 方程与 Smo. 方程的关系。用变分法解位能形式比较复杂的多维 F-P 方程以及推导质量系数与粘滞系数均随形变参量变化的多维 Smo. 方程的工作正在进行中。

* 国家博士点基金支持。

2 理论方法

Fokker-Planck 方程是一个非自厄的线性微分方程, 通常的变分方法不能适用, 推广的变分原理已有原则上的讨论^[1]. 下面将给出具体应用于 F-P 方程的简要推导.

一维的 F-P 方程为:

$$\frac{1}{\tau_0} \frac{\partial W}{\partial t} = -v \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial v} + \beta \left[\frac{\partial}{\partial v} (Wv) + \frac{\partial^2 W}{\partial v^2} \right], \quad (1)$$

这里, 位能 U 的单位为 kT ; 速度 v 的单位取为 $\sqrt{kT/m}$, m 为质量; 时间单位 $\tau_0 = 10^{-21}$ s; 长度单位 $l = 1.16 \times 10^{-13}$ cm. 则(1)式中的 τ_0 及 β 为:

$$\tau_0 = \frac{t_0}{l} \sqrt{\frac{kT}{m}}, \quad \beta = \frac{l\alpha}{m} \sqrt{\frac{m}{kT}}, \quad \alpha \text{ 为粘滞系数}, \quad (2)$$

令

$$W = Ae^{-\tau_0 \omega t} F, \quad (3)$$

则(1)式可化为本征方程的形式:

$$\hat{L}F = \omega F, \quad (4)$$

$$\hat{L} = v \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial}{\partial v} - \beta \left[1 + v \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right]. \quad (5)$$

设 $x \rightarrow \pm\infty$ 时, $U \rightarrow \infty$; 且 F 在 xv 的整个区间都是平方可积的, 则可以定义 \hat{L} 的共轭算符 \hat{L}^+ , 对任意两平方可积函数 ψ_1 及 ψ_2 有:

$$\int \psi_1 \hat{L} \psi_2 d\tau = \int \psi_2 \hat{L}^+ \psi_1 d\tau, \quad (6)$$

$d\tau = dv dx$. 取泛函数 $I(F, G)$ 为:

$$I(F, G) = \int \Phi G \hat{L} F d\tau, \quad (7)$$

其中 Φ 为任意函数. 在条件

$$\int \Phi F G d\tau = 1 \quad (8)$$

下对 I 变分求极值, 以 ω 为拉格朗日不定乘子, 则

$$I(F, G) = \int \Phi G \hat{L} F d\tau - \omega \int \Phi F G d\tau. \quad (9)$$

关于 G 变分得:

$$\frac{\delta I}{\delta G} = \Phi \hat{L} F - \omega \Phi F = 0 \quad \text{即} \quad \hat{L} F = \omega F, \quad (10)$$

(10)式即(4)式. 利用(6)式将(9)式变为:

$$I(F, G) = \int F \hat{L}^+ \Phi G d\tau - \omega \int \Phi F G d\tau,$$

关于 F 变分得:

$$\frac{\delta I}{\delta F} = \hat{L}^+ \Phi G - \omega \Phi G = 0 \quad \text{即} \quad \hat{L}^+ \Phi G = \omega \Phi G. \quad (11)$$

利用共轭算符的定义(6)式,经部分积分不难获得(5)式 \hat{L} 的共轭算符为:

$$\hat{L}^+ = -\nu \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \nu} + \beta \left(\nu \frac{\partial}{\partial \nu} - \frac{\partial^2}{\partial \nu^2} \right), \quad (12)$$

取
$$\Phi = e^{U(x)} e^{\nu/2}, \quad (13)$$

则
$$\hat{L}^+ \Phi G = \Phi \left[-\nu \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \nu} - \beta \left(1 + \nu \frac{\partial}{\partial \nu} + \frac{\partial^2}{\partial \nu^2} \right) \right] G$$

$$= \Phi \hat{L}' G.$$

(11)式成为:
$$\hat{L}' G = \omega G, \quad (14)$$

比较 \hat{L}' 与 \hat{L} , 可以看出 $\hat{L}'(-\nu, x) = \hat{L}(\nu, x)$, (14)式就成为:

$$\hat{L}(\nu, x) G(-\nu, x) = \omega G(-\nu, x). \quad (15)$$

与(10)式比较:
$$G(-\nu, x) = F(\nu, x), \quad (16)$$

设 $\omega_1, \omega_2, \dots$ 为一系列本征值, 从(10)与(11)式有

$$\hat{L} F_i = \omega_i F_i, \quad \hat{L}^+ \Phi G_i = \omega_i \Phi G_i$$

有

$$\int \Phi G_i \hat{L} F_i d\tau = \omega_i \int \Phi G_i F_i d\tau$$

$$\int F_i \hat{L} \Phi G_i d\tau = \omega_i \int F_i \Phi G_i d\tau$$

从共轭算符关系式(6), 上两式等式左边是相等的, 因而得:

$$(\omega_i - \omega_j) \int \Phi F_i G_j = 0 \text{ 当 } i \neq j \text{ 时结合条件(8)有:}$$

$$\iint \Phi(x, \nu) F_i(x, \nu) G_j(x, \nu) dx d\nu = \delta_{ij}, \quad (17)$$

这是本征函数必须满足的正交归一条件。

与 $\omega_0 = 0$ 相对应的本征函数 F_0 为 W 的平衡解。从本征方程不难看出:

$$F_0(x, \nu) = B e^{-U(x)} e^{-\nu/2}, \quad (18)$$

B 为常数。 $W(x, \nu, t)$ 可写成:

$$W(x, \nu, t) = A_0 F_0(x, \nu) + \sum_{i=1} A_i e^{-\tau \omega_i} F_i(x, \nu), \quad (19)$$

常数 A_0 及 A_i 分别用 $t \rightarrow \infty$ 及 $t \rightarrow 0$ 时的条件决定。 $t \rightarrow \infty$ 时, 从 W 的归一化条件得:

$$A_0 = \frac{1}{\iint_{-\infty}^{\infty} F_0(x, \nu) dx d\nu}. \quad (20)$$

设 $t = 0$ 时, $x = 0$, 速度为平衡态分布。 则从(19)式得:

$$A_0 F_0(x, \nu) + \sum_{i=1} A_i F_i(\nu, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\nu/2} \delta(x), \quad (21)$$

这里, 让位能初始谷的坐标选为 $x = 0$, 且让 $U(x=0) = 0$, 因而有:

$$\Phi(x=0, \nu) = e^{\nu/2}. \quad (22)$$

以 $\Phi F_i(x, -\nu)$ 乘(21)式后关于 $d\tau$ 积分得:

$$A_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int F_i(x=0, -v) dv, \quad (23)$$

定出了 A_0 及 A_i , 则 F-P 方程的解为:

$$W = \frac{e^{-U} e^{-v^2/2}}{\iint_{-\infty}^{\infty} e^{-U} e^{-v^2/2} dx dv} + \sum_{j=1}^{\infty} A_j e^{-\omega_j} F_j. \quad (24)$$

为了计算本征值 ω_j 与本征函数, 先将 $F(x, v)$ 对 v 的依赖用带权的厄米多项式 $H_{n,m}(v)$ 展开:

$$F(x, v) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-U/2} e^{-v^2/2} (2\pi)^{-1/2} \frac{1}{\sqrt{m!}} H_{n,m}(v) \phi_m(x) \quad (25)$$

代入(9)式并利用厄米多项式的关系式将 v 积分掉, 则泛函数 I 成为 $\phi_n(x)$ 的函数:

$$I = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \int \phi_n(x) [2\sqrt{n+1} J_- \phi_{n+1}(x) + (\beta_n - \omega) \phi_n(x)] dx, \quad (26)$$

其中

$$J_- = \frac{d}{dx} - \frac{1}{2} \frac{dU}{dx}, \quad J_+ = \frac{d}{dx} + \frac{1}{2} \frac{dU}{dx}, \quad (27)$$

从 $\frac{\delta I}{\delta \phi_0} = 0$

得 $J_- \phi_1 - \omega \phi_0 = 0, \quad (28)$

从 $\frac{\delta I}{\delta \phi_1} = 0$

得 $J_+ \phi_0 + \sqrt{2} J_- \phi_1 + (\beta - \omega) \phi_1 = 0, \quad (29)$

若忽略 ϕ_2 , 从(28)、(29)式中消去 ϕ_1 得:

$$J_- J_+ \phi_0 + (\beta - \omega) \omega \phi_0 = 0. \quad (30)$$

而 $J_- J_+ = \frac{d^2}{dx^2} + \left[\frac{1}{2} \frac{d^2 U}{dx^2} - \frac{1}{4} \left(\frac{dU}{dx} \right)^2 \right]$, 若(30)式中 $(\beta - \omega)$ 中的 ω 忽略, 则(30)式

即成为一维的 Smo. 方程. 从(2)式知, β 与粘滞系数 α 成正比, ω 是方程(4)的本征值. 从(18)式知, 在 t 不太小时, 较大的 ω_j 对 W 的贡献可以忽略, 因而在粘滞性足够大时, $\beta - \omega$ 中忽略 ω 是可行的. 这说明了 Smo. 方程是 $F(x, v)$ 的展开式只取 $n = 0, 1$ 两项时且 $\beta - \omega$ 中忽略了 ω 所得的结果. 这为推导多维的且质量系数与粘滞系数均随形变参量变化的 Smo. 方程打下了基础.

为了得 F-P 方程的解, 将(26)式中的 $\phi_n(x)$ 也用厄米多项式展开:

$$\phi_n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_{ni} \phi_i(x), \quad (31a)$$

$$\phi_i(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^i i!}} H_i(x) e^{-x^2/2}. \quad (31b)$$

这样, (26)式经关于 x 积分后, I 成为 α_{ni} 的函数. 若取 $n = 0, 1, 2, \dots, (r-1)$,

$s = 0, 1, 2, \dots, (q-1)$, 则从 $\frac{\partial J}{\partial \alpha_s} = 0$, 可得 $r \times q$ 个线性联立方程, 解此 $r \times q$ 个线性联立方程就得 $r \times q$ 个本征值 ω_j 及相应的本征函数 F_j , 从而获得 F-P 方程的解 W .

3 计算结果

鉴于本工作的目的重在方法的探索, 因而用文献[1, 4]中的位能. 位能形式为

$$U = G[x^4 + a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4] + H, \quad (32)$$

其中常数: $G = 0.0089366$, $H = 3.816$, $a_1 = -28.328$,

$$a_2 = 121.587, a_3 = 0.3729, a_4 = -427.05$$

初始位谷在 $x = 0$ 处, 位峰在 $x = x_c = 3.41$ 处. 当 $kT = 1\text{MeV}$ 时, 位峰高度为 $H_0 = 3.816\text{MeV}$. 在位峰后 $x = 17.84$ 处, 有一深 -193.92 的位阱. 当粒子越过位峰时, 就认为已发生裂变. 令 $J(t)$ 为 t 时刻粒子还处于高峰以内的几率, 则

$$J(t) = \int_{-\infty}^{x_c} dx \int_{-\infty}^{\infty} dv W(x, v, t), \quad (33)$$

裂变几率 P 为:

$$P = -\frac{1}{J} \frac{dJ}{dt}. \quad (34)$$

核子数 $A = 248$, 取 $\frac{\alpha}{m} = 1, 2, \dots, 6$ 等值, m 为原子核质量. 取 $r = 7$ 或 9 , $q = 25$,

即速度 v 用 7 或 9 项, 坐标用 25 项厄米多项式展开. 计算结果如图 1 及图 2 所示. 图 1 为 $\frac{\alpha}{m} = 1$ 时, 裂变几率

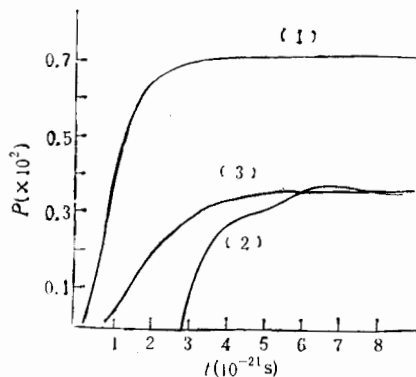


图 1 裂变几率 P 随时间 t 的变化
 t 的单位 10^{-21}s

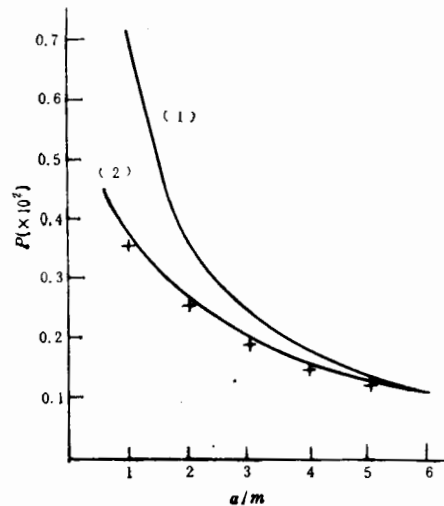


图 2 裂变几率 P 随粘滞系数 α 的变化
横坐标为 α/m .

随时间 t 的变化. 曲线(1)为 Smo. 方程的解, 曲线(2)为 F-P 方程的解. 可以看出, 在

$\frac{\alpha}{m} = 1$ 时, Smo. 方程的解与 F-P 方程的解相差较大。由于解 225 行 225 列的矩阵的本征值时,有不少是复数,因而导致裂变几率在 t 小时的振荡。我们试着对振荡部分采取平均值的办法,曲线(3)即试用这方法所得结果。文献[4]中用 Monte Carlo 方法所得结果基本上与曲线(3)重合。曲线(2)则与文献[1]的数字解比较接近。图 2 为裂变几率稳定值随 α/m 的变化。曲线(1)为 Smo. 方程的稳定值,曲线(2)为 F-P 方程的稳定值。可以看出只有在 $\alpha/m \geq 6$ 时, Smo. 方程的稳定值才与 F-P 方程趋向一致。图中“+”为用 Kramers 公式:

$$P' = \frac{\omega_A}{4\pi\omega_c\tau} [\sqrt{1 + 4\tau^2\omega_c^2} - 1]e^{-H_0/4T}. \quad (35)$$

计算结果: ω_c 与 ω_A 分别为鞍点与平衡点振动频率。这说明了若只要求裂变几率的稳定值, Kramers 公式是很方便也比较准确的公式。

感谢舒能川与赵强两位同学对本文计算工作的大力协助。

参 考 文 献

- [1] P. Grange, L. Jun qing and H. A. Weidenmuller, *Phys. Rev. C*, **27**(1983) 2063.
- [2] 冯仁发等,高能物理与核物理,**8**(1984)453.
- [3] 冯仁发、吴锡真、卓益忠,原子核物理,**10**(1988)16.
- [4] 钟云霄,高能物理与核物理,**13**(1989)451.
- [5] Zhong Yunxiao and Hu Jimin, 50 Years with Nuclear Fission, **Vol. II** (1989) 668, American Nuclear Society, Inc.
- [6] 钟云霄,高能物理与核物理,**9**(1985)108.
- [7] 钟云霄、陈俊珍,高能物理与核物理,**9**(1985)356.
- [8] 钟云霄、张敏钊,原子核物理,**7**(1985)258.
- [9] S. Chandraseckhar, *Rev. Mod. Phys.*,**15**(1943) 1.
- [10] 钟云霄,热力学与统计物理,科学出版社,(1988)296.
- [11] A. M. Arthurs, *Complementary Variational Principles* 2nd ch, (1980) Clarendon Press: Oxford.

Fission Probability Calculation by Solving Fokker-Planck Equation With Variation Method

Zhong Yunxiao Hu Jimin

(Dept. of Technical Physics, Peking University, Beijing 100871)

Received on November 30, 1992

Abstract

A variational method is developed to solve Fokker-Planck (F-P) equation. One dimensional fission probability is calculated and compared with other methods. The relation of F-P equation and Smoluchowski equation is discussed in light of this method, which gives the way to derive the multi-dimensional Smoluchowski equation with varying mass and viscosity and to solve more complicated F-P equations.

Key words Variation method, Fokker-Planck equation, Probability of fission.