

核反应动力学中的模拟方法*

包景东¹⁾

(北京师范大学物理系 北京 100875)

摘要 在简析蒙特卡罗方法的基本思想和实现的基础上,给出了在熔合裂变反应研究中常见的两类随机方程:主方程和 Langevin 方程的模拟算法.完成了 3 个实例的计算,并与实验结果做了比较.

关键词 核反应动力学 蒙特卡罗方法 主方程 Langevin 方程 熔合裂变应用

1 引言

原子核大振幅集体运动,例如重离子熔合反应和受激复合核裂变,可以看成是一个热涨落驱动的布朗运动.也就是把表征核表面形状变化的宏观参数处理为在多维空间运动的布朗粒子的集体坐标,内部核子被视为一个热浴,两者的耦合给出集体变量的摩擦和耗散.布朗粒子在形变势能面上的位置就对应于一个核形状.在复合核形变过程中,还伴随着轻粒子(主要是中子)从复合核中随机地发射出去.目前,研究这类问题的主要手段是扩散模型^[1],可以用 Fokker-Planck 方程、Langevin 方程和主方程来描写.形变势能包括液滴模型中的库仑能、表面能和转动能三部分加上壳对修正,而坐标依赖的惯性和粘滞张量分别根据无旋不可压缩流体力学和墙加窗单体耗散机制获得.各种反应截面、断裂前中子发射多重性及复合核寿命、裂变碎片角分布、裂变碎片动能-质量-电荷分布等实验观测量均可以用扩散模型来计算.

原则上讲,数值求解偏微分方程(Fokker-Planck 方程)比常微分方程(Langevin 方程)麻烦的多,尤其是多维和动力学系数依赖于坐标的复杂情况.蒙特卡罗(MC)方法是模拟由常微分动力学方程描述的轨道,从而获得任意时刻由很多实验粒子组成的系综的统计分布,计算某些输出量的平均.然而由于 MC 方法的计算结果的误差具有随机性,因此对结果可靠性的检验是必要的,尤其是对时间步长的非依赖性.

2 蒙特卡罗方法的基本思想

蒙特卡罗方法也称随机模拟方法^[2],基本思想是确定一个统计量,其数学期望正是所要求的值;或构造一个概率过程,它的某些参量为欲求问题的解.该方法的特点是:受问题的条件影响不大;收敛速度和误差与维数无关;不必进行离散化处理;具有较强的直接解决问题的能力;便于并行计算等.但它比确定性数值算法的收敛速度慢.鉴于这些优点,这一方法在许多领域被广泛地使用.实现 MC 算法的核心步骤是由已知分布抽出简单子样,然后计算目标量的统计分布或数字特征量.

现以射击运动员打靶平均成绩为例,来说明 MC 方法的基本思路.

$$E(g) = \int_a^b g(x)f(x)dx, \quad (1)$$

其中 $f(x)$ 是弹着点的分布密度函数, $g(x)$ 是统计量(成绩).它的 MC 估计是

$$\hat{G}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g(X_F^{(n)}). \quad (2)$$

显然,这不同于数值积分的求和公式,这里变量的样本点 $X_F^{(n)}$ 是由 $f(x)$ 随机抽样得到的.可以说 MC 方法更符合物理过程本身,因为大分布密度区间中的样本点被取到的概率大,对积分的贡献也就大. MC 方法的最低要求是能计算一个与样本点个数有关的统计量

* 国家自然科学基金(10235020)和教育部博士点专项科研基金(20050027001)资助

1) E-mail: jdbao@bnu.edu.cn

\hat{G}_N , 对任意小的 ε , 应有

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(|\hat{G}_N - G| < \varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-X_\alpha}^{X_\alpha} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt, \quad (3)$$

式中 ε 就是 MC 误差, 写作

$$\varepsilon = \frac{X_\alpha \sigma}{\sqrt{N}}, \quad (4)$$

X_α 是一个与置信水平相联系的常数, σ 是统计量 g 在分布密度函数 f 下所抽取的实验点的计算均方根差. MC 计算结果是以一定概率收敛于真值. 从 MC 的误差公式可以看出, 提高 MC 方法的精度不能盲目地增加实验次数, 而是应设法降低实验方差, 后者就是 MC 方法的技巧所在.

为本文的需要, 现列举常用的几种抽样方法.

(a) 直接反函数法: 设 $f(x)$ 是一个定义于 $[a, b]$ 区间的分布密度函数, 任选一个随机点 X_F , $a \leq X_F \leq b$, $F(X_F) = \int_a^{X_F} f(x) dx = \xi$, 这里 ξ 是一个 $[0, 1]$ 区间均匀分布的随机数 (许多算法语言的一个固化库函数). 如果可以求出原函数的反函数, 那么 $X_F = F^{-1}(\xi)$.

(b) 舍选法: 考虑定义在 $[0, 1]$ 的分布 $f(x)$, 并假设 $f(x)$ 的极大值为 M . 现产生一对 $[0, 1]$ 均匀分布随机数 ξ 和 ξ' , 如果 $M\xi' \leq f(\xi)$ 成立, 则 $X_f = \xi$; 否则继续做判断. 这样所得到的随机变量 X_F 的集合构成了 $f(x)$ 分布.

(c) 复合抽样法: 已知 $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x|y)f_1(y)dy$, 其中 $f_2(x|y)$ 是一个条件概率密度分布函数, 先由 $f_1(y)$ 抽样出 Y_{F_1} , 代入 $f_2(x|y)$, 则 $X_F = X_{F_2}(x|Y_{F_1})$.

(d) 加分布抽样法: 已知 $f(x) = \sum_{n=1}^N p_n f^{(n)}(x)$,

其中, $p_n \geq 0$ 和 $\sum_{n=1}^N p_n = 1$, $f^{(n)}(x)$ 是 n 个分布密度函数. 现产生一个 $[0, 1]$ 均匀分布随机数 ξ , 如果 $\sum_{i=1}^{n-1} p_i < \xi \leq \sum_{i=1}^n p_i$, $X_F = X_{F^{(n)}}$.

由于 MC 方法收敛速度慢、误差具有随机性, 因此最好能将 MC 方法与部分解析和确定性数值计算相结合. 这里提及 MC 的技巧之一: 重要抽样. 即改变统计量和分布函数的形式, 但不改变所要求的统计量平均. 用以下的数学形式来表达

$$E(g) = \int g(x)f(x)dx = \int \left(\frac{g(x)f(x)}{f^*(x)} \right) f^*(x)dx, \quad (5)$$

依 $g(x)f(x)$ 在随机变量取值范围内的重要性确定合适的密度分布函数 $f^*(x)$, 从 $f^*(x)$ 中抽样, 使 $\sigma^2[g(x)f(x)/f^*(x)|f^*(x)]$ 达到极小. 这样一来, 能达到用较少的样本点而获得较高的精度.

3 两类常见随机方程的数值模拟

3.1 主方程的蒙特卡罗模拟

主方程曾被成功地用来研究相变 Ising 模型, 最近在双核模型^[3]研究超重核合成机制中显示出生命力.

设分布密度函数 $P(x, t)$ 非负和可归一, 即 $P(x, t) \geq 0$ 和 $\int_{\Omega} P(x, t) dx = 1$, 其满足以下的主方程

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \int_{\Omega} W(x' \rightarrow x, t) P(x', t) dx' - \int_{\Omega} W(x \rightarrow x', t) P(x, t) dx', \quad (6)$$

$$P(x, t=0) = S(x), \quad (7)$$

式中 $W(x' \rightarrow x, t)$ 是跃迁函数, $S(x)$ 为初始分布. 现定义一个跃迁率: $W_t(x, t) = \int_{\Omega} W(x \rightarrow x', t) dx'$, 表示系统在状态 x 和时刻 t , 单位时间内向周围各态发生跃迁的总次数. 则原方程变为

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} + W_t(x, t) P(x, t) = \int_{\Omega} W(x' \rightarrow x, t) P(x', t) dx', \quad (8)$$

将主方程写成差分分解的形成并整理, 有

$$P(x, t + \Delta t) = [1 - \Delta t W_t(x, t)] P(x, t) + \Delta t \int_{\Omega} W(x' \rightarrow x, t) P(x', t) dx', \quad (9)$$

本文用最大跃迁率 MC 方法模拟主方程. 跃迁率 $W_t(x, t)$ 与 x 和 t 均有关, 但其有界, 令 $W_{\max} = \max[W_t(x, t)]$. 现选时间步长为 $\Delta t = W_{\max}^{-1}$, 可将式(9)写成迭代形成

$$P_{n+1}(x) = \int_{\Omega} \tilde{W}(x' \rightarrow x, t_n) P_n(x') dx', \quad (10)$$

$$P_0(x) = S(x), \quad (11)$$

其中 $t_n = n\Delta t$,

$$\tilde{W}^*(x' \rightarrow x, t_n) = \left(\frac{W_t(x', t_n)}{W_{\max}} \right) \frac{W(x' \rightarrow x, t_n)}{W_t(x', t_n)} + \left(\frac{W_{\max} - W_t(x', t_n)}{W_{\max}} \right) \delta(x - x'), \quad (12)$$

满足 $\int_{\Omega} \tilde{W}^*(x' \rightarrow x, t_n) dx = 1$.

分布 $P(x, t)$ 的样本可用以下方法产生:

(i) x_0 由初始分布抽样产生;

(ii) x_n 给定后, x_{n+1} 由 $\tilde{W}^*(x' \rightarrow x, t_n)$ 抽样产生.

注意到第二步是一个加分布抽样. 产生一个 $[0, 1]$ 区间的均匀分布随机数 ξ , 如果 $0 < \xi < W_t(x', t_n)W_{\max}^{-1}$, x 从条件概率密度分布函数 $W(x' \rightarrow x, t_n)/W_t(x', t_n)$ 中抽样; 否则, $x = x'$.

这样, 我们就把主方程的时间有关的解转变成为一个MC复合抽样过程^[4]. 如果人们只感兴趣稳态下的结果, 可以利用细致平衡原理下的Metropolis算法^[5], 借助于能量判据, 通过构造一个人为的Markov链而获得最终的解.

3.2 朗之万方程的随机龙格-库塔算法

原子核的大振幅集体运动, 例如熔合和裂变过程, 可用如下的多维Langevin方程组来描写

$$\dot{q}_i(t) = m_{ij}^{-1}(\mathbf{q})p_j, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \dot{p}_i(t) = & -\frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial q_i} - \gamma_{ij}(\mathbf{q})m_{jk}^{-1}(\mathbf{q})p_k - \\ & \frac{1}{2} \frac{m_{jk}^{-1}(\mathbf{q})}{\partial q_i} p_j p_k + g_{ij} \Gamma_j(t), \end{aligned} \quad (14)$$

式中随机力 $\Gamma_i(t)$ 满足: $\langle \Gamma_i(t) \rangle = 0$ 和 $\langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t-t')$. 现用随机龙格-库塔算法迭代求解,

$$q_i(t+\Delta t) = q_i(t) + \frac{\Delta t}{2} [m_{ij}^{-1}(\mathbf{q})p_j + m_{ij}^{-1}(\mathbf{q}^*)p_j^*], \quad (15)$$

$$\begin{aligned} p_i(t+\Delta t) = & p_i(t) + \frac{\Delta t}{2} [h_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + h_i(\mathbf{q}^*, \mathbf{p}^*)] + \\ & \frac{1}{2} [g_{ij}(\mathbf{q}) + g_{ij}(\mathbf{q}^*)] \sqrt{2\Delta t} \Psi_j, \end{aligned} \quad (16)$$

$q^*(t)$ 和 $p^*(t)$ 为坐标和动量在单步迭代中的预估值, 即

$$q_i^*(t) = q_i(t) + m_{ij}^{-1} p_j \Delta t, \quad (17)$$

$$p_i^*(t) = p_i(t) + h_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \Delta t + g_{ij} \sqrt{2\Delta t} \Psi_j, \quad (18)$$

式中

$$\begin{aligned} h_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = & -\frac{\partial V}{\partial q_i} - \gamma_{ij} m_{jk}^{-1} p_k(t) - \\ & \frac{1}{2} \frac{m_{jk}^{-1}}{\partial q_i} p_j(t) p_k(t), \end{aligned} \quad (19)$$

$$g_{ik} g_{kj} = T \gamma_{ij}. \quad (20)$$

Ψ_i 是均值是零、方差为1的高斯随机数. 在每一步的预估和修正中, 所用的高斯随机数是相同的, 其为

$$\Psi_i^{(1)} = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \cos(2\pi \xi_2), \quad (21)$$

$$\Psi_i^{(2)} = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \sin(2\pi \xi_2).$$

本算法的精度是二阶的, 但不像随机泰勒展开算法那样还要对非线性的漂移项和噪声强度作微扰展开, 避免了对复杂势场力和乘性噪声因子项再一次求空间导数, 因此是值得推荐采用的^[6]. 应该强调的是,

用MC模拟随机过程尤其是对涨落量高次矩的计算, 需要进行结果对时间步长的变化规律的检验, 只有呈现平台状, 数值结果才是可靠的. 我们在物理上曾提出时间步长的选取应该“宏观小微观大”^[7].

白噪声是一个快变化的量, 在迭代的每一步, 将对时间积分的冲量作为一个随机变量, 用高斯随机数来模拟. 对于色噪声驱动的随机过程, 不能仅根据噪声关联函数来确定噪声冲量的强度, 而且还应将其的驰豫性体现出来, 即用一个白噪声驱动一个线性微分方程的解变量来表示色噪声^[8]. 对于含记忆阻尼的广义Langevin方程, 应通过引入中间变量, 将之转换成为一个Markov-Langevin方程组^[9]. 对于含大参数的stiff问题, 可采取所有线性部分精确闭合递推^[10], 而非线性项用龙格-库塔算法的综合策略. 对无法用一个Langevin方程来产生的噪声或空间噪声, 可使用快速Fourier变换方案^[11, 12].

4 应用举例

我们在早期的工作中, 用二维Langevin方程的MC模拟系统地计算了多个铜系核及较宽能区的裂变碎片动能和质量分布的平均值和方均涨落^[13, 14], 与实验结果符合. 这些输出量强烈地依赖于碎片的形变. 本节用实验粒子组成的一个系综随时演化的Langevin模拟, 给出我们最近的一些熔合与裂变结果.

4.1 重核熔合几率

采用二参数 $\{z, \varepsilon\}$ 双中心壳模型描写两重离子接触到形成复合核的过程, 这里 z 是两碰撞核质心距减去球形复合核半径的一半, ε 为颈部参数. 基于熟知的方法计算Langevin方程中用到的二维形变势能、惯性和粘滞张量. 初始时刻在接触点置 N_{total} 个具有相同动能的实验粒子, 时间有关的鞍点通过率数值定义为^[15]

$$P_{\text{pass}}(t) = \frac{N_{\text{pass}}(t)}{N_{\text{total}}}, \quad (22)$$

式中 $N_{\text{pass}}(t)$ 为 t 时刻已通过复合核形变势能鞍点脊线, 且能到达球形复合状态 ($x=0, \varepsilon=1$) 的粒子数. 通过几率的稳定值就是重核熔合几率 P_{fus} . 在图1, 我们计算给出了 $^{100}\text{Mo} + ^{110}\text{Pd}$ 反应系统的熔合几率随质心能量的变化, 并与一维扩散模型 ($\varepsilon=1$) 的结果和实验数据进行了比较. 从中可见, 二维Langevin模型给出了较好的结果.

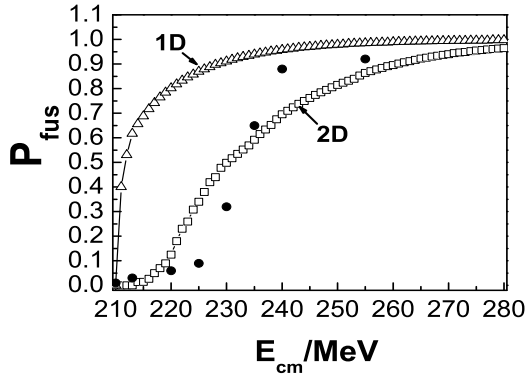


图 1 $^{100}\text{Mo}+^{110}\text{Pd}$ 反应的融合几率随质心能量的变化
黑点是实验数据.

4.2 裂变速率

在初始时刻, 我们将 N_0 个实验粒子置于复合核形变势能的基态, 坐标是一个 δ 分布, 动量满足热平衡分布. 时间有关的核裂变速率数值定义为^[16, 17]

$$r(t) = -\frac{1}{N(t)} \frac{\Delta N}{\Delta t}, \quad (23)$$

这里 $N(t)$ 是 t 时刻仍在复合核裂变势阱内而未越过裂变鞍点的粒子数, $\Delta N(t)$ 为在 $t \sim t + \Delta t$ 间隔内从阱内越过鞍点而不再返回阱内的实验粒子数.

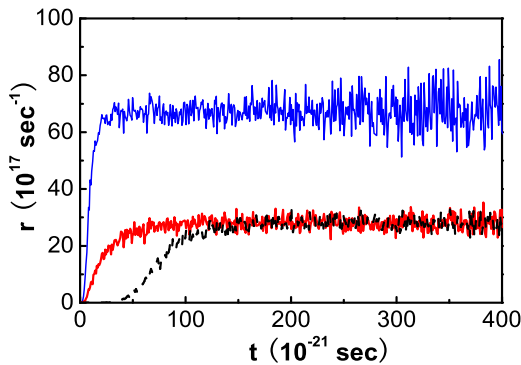


图 2 用 3 种统计方法计算的 ^{254}Cf 核的裂变速率

图 2 是 ^{254}Cf 核的裂变速率随时间的演变. 其中, 最上方的曲线是以往实验粒子首次通过鞍点的计算结果, 最下面的曲线系实验粒子到达断点的结果. 可见前者比后者大了几乎两倍. 因此, 许多作者认为裂变不能定义在鞍点而只能在断点. 这里, 中间的曲线

是我们提出的实验粒子最后一次离开鞍点作为裂变速率的定义, 稳定值与断点结果一致. 这是因为我们的方法计及了每个粒子在热涨落作用下在鞍点附近反复振荡, 即鞍点回流效应^[17]. 这解决了裂变速率鞍点的有效性问题, 对一般的亚稳系统也有意义.

4.3 裂变核断点前中子发射多重性

MC 方法计算中子从裂变核中随机蒸发的做法是^[17]: 在模拟的每一步抽取一个 $[0, 1]$ 均匀分布随机数 ξ , 看中子半衰期 τ_n 与时间步长 Δt 的比是否大于这个随机数, 如果 $\Delta t / \tau_n > \xi$, 将有一个携带一定能量的中子蒸发出去, 复合核的温度降低; 否则无中子发射. 对每条从基态出发断点态终止的轨道均进行这样的判断, 然后对所有的轨道中发射的中子数做平均^[18]. ^{223}Th 裂变核的断点前中子发射多重性的 MC 结果在图 3 中给出.

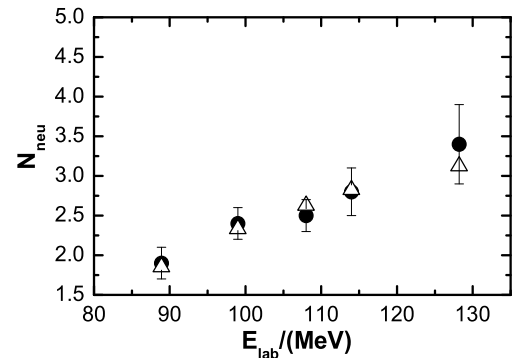


图 3 ^{223}Th 裂变核的断点前中子发射多重性
空心三角点为理论结果, 带误差棒黑点是实验数据.

5 小结

蒙特卡罗方法在核反应问题的研究中入手容易、程序简单, 是以大量随机样本的统计平均为代价. 用该方法求解主方程, 实质上是变成了一个抽样过程, 对同一时刻每个粒子所处的位置与动量进行统计, 可以得到分布密度函数; 用该方法求解 Langevin 方程, 核心是在每一迭代步用高斯随机数模拟随机力冲量. 两者均能推广到多维情况, 而后者又可方便地考虑真实的势、坐标和温度依赖的动力学系数. 基于这两种技术对超重核的合成机制^[19, 20] 的研究正在进行中.

参考文献(References)

- 1 DING Da-Zhao, CHEN Yong-Shou, ZHANG Huan-Qiao. Progress of Nuclear Physics. Shanghai: Shanghai Scientific & Technical Publishers, 1992 (in Chinese)
(丁大钊, 陈永寿, 张焕乔. 原子核物理进展, 上海: 上海科学技术出版社, 1992)
- 2 PEI Lu-Cheng, ZHANG Xiao-Ze. Monte-Carlo Method and Applications in Transport Problems of Particles. Beijing: Science Press, 1986 (in Chinese)
(裴鹿成, 张孝泽. 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用. 北京: 科学出版社, 1986)
- 3 ZHAO En-Guang, LI Jun-Qing, SCHEID W. Nucl. Phys. Rev., 2005, **22**(4): 313 (in Chinese)
(赵恩广, 李君清, SCHEID W. 原子核评论, 2005, **22**(4): 313)
- 4 Nanbu K. J. Phys. Soc. Japan, 1982, **52**: 2654
- 5 Binder K, Heermann D W. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. Beilin: Springer-Verlag, 1988
(秦克诚译. 统计物理学中的蒙特卡罗方法. 北京: 北京大学出版社, 1994)
- 6 BAO J D, ZHUO Y Z. Phys. Lett., 1998, **A239**: 228
- 7 BAO Jing-Dong, Xu Shu-Yan, ZHUO Yi-Zhong. Chinese J. Comput. Phys., 1989, **6**:181(in Chinese)
(包景东, 许淑艳, 卓益忠. 计算物理, 1989, **6**: 181)
- 8 BAO J D et al. J. Stat. Phys., 1992, **66**: 1653; 1998, **90**: 1037; 2000, **99**: 595; 2001, **102**: 361; 2004, **114**: 503
- 9 BAO J D, ZHUO Y Z. Phys. Rev. Lett., 2003, **91**: 138104
- 10 BAO J D, LI R W, WU W. J. Comput. Phys., 2004, **197**: 241
- 11 LV K, BAO J D. Phys. Rev., 2005, **E72**, 067701
- 12 BAO J D, ZHOU Y. Phys. Rev. Lett., 2005, **94**: 188901; ZHOU Y, BAO J D. Phys. Rev., 2006, **E73**: 031103
- 13 BAO Jing-Dong, ZHUO Yi-Zhong. HEP & NP, 1989, **13**: 1023(in Chinese)
(包景东, 卓益忠. 高能物理与核物理, 1989, **13**: 1023)
- 14 BAO J D, ZHUO Y Z, WU X Z. Z. Physick, 1995, **A352**: 321
- 15 LIU Ling, LU Kun, BAO Jing-Dong. HEP & NP, 2004, **28**(8): 854(in Chinese)
(刘玲, 吕坤, 包景东. 高能物理与核物理, 2004, **28**(8): 854)
- 16 BAO J D, JIA Y. Phys. Rev., 2004, **C69**: 027602
- 17 JIA Ying, LIU Ling, BAO Jing-Dong. HEP & NP, 2003, **27**(7): 610(in Chinese)
(贾莹, 刘玲, 包景东. 高能物理与核物理, 2003, **27**(7): 610)
- 18 JIA Ying, BAO Jing-Dong. HEP & NP, 2006, **30**: 868(in Chinese)
(贾莹, 包景东. 高能物理与核物理, 2006, **30**(9): 868)
- 19 Abe Y, Boilley D, Kosenko G, BAO J D et al. Prog. Theor. Phys. Suppl., 2002, **146**: 104
- 20 LIU Z H, BAO J D. Science in China, 2006, **G36**: 437(in Chinese)
(刘祖华, 包景东. 中国科学, 2006, **G36**: 437)

Simulating Methods in Nuclear Reaction Dynamics^{*}

BAO Jing-Dong¹⁾

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

Abstract Based on analysis for the idea and features of the Monte Carlo method, we propose the simulating algorithms for the stochastic equations of two kinds describing nuclear fusion and fission dynamics: the master equation and the Langevin equation. The calculated results for three examples are in agreement with the experimental data.

Key words nuclear reaction dynamics, Monte-Carlo method, master equation, Langevin equation, fusion-fission applications

^{*} Supported by National Natural Science Foundation of China (10235020) and Doctoral Program Foundation of Ministry of Education of China (20050027001)

¹⁾ E-mail: jdbao@bnu.edu.cn