裂变扩散方程的协变性

包 景 东
(北京气象学院 北京 100081)
1992 年 7 月 13 日收到

摘 要

研究了描述原子核裂变过程的 Langevin 方程和 Fokker-Planck 方程的协变性，给出了动力学参数的坐标变换规律.

关键词 核裂变，扩散方程，坐标变换，协变性.

1 引 言

文献 [1—4] 研究了 N 维坐标空间的 Langevin 方程和 Fokker-Planck(F-P) 方程的协变性. 其中，Langevin 方程里的广义速度和确定力项被当作逆变矢量，只有补充谐和条件，才能把它写成保持非线性坐标变换不变的标量方程[2]. 而对等价的 F-P 方程中的漂移矢量，需引入一个修正项可使其为逆变矢量，扩散系数为二阶逆变张量. 但该方程的分布函数解是非坐标变换不变量.

本文将嵌套在 $2N$ 维相空间内，用以描写核裂变扩散的 Langevin 方程或 F-P 方程中的与坐标有关的惯性和粘滞矩阵处理为两个正定的二阶协变张量，避免了上述工作之不足，进而给出以往未涉及的这两类方程的正确的协变形式. 本文还研究了动力学参数随坐标的变换关系，并指出裂变速率，碎片动能等物理量与集体坐标的选取无关.

2 Langevin 方程和 F-P 方程的协变性

为了研究 Langevin 方程和 F-P 方程的协变形式，引入一个 N 维黎曼空间的相互单值可逆的任意定常坐标变换

$$\tilde{q}^i = \tilde{q}^i(q^1, q^2, \cdots, q^N), i = 1, 2, \cdots, N. \tag{1}$$

其中函数 $\tilde{q}^i$ 有连续的各阶导数，且变换的 Jacobian 不等于零，即

$$\frac{\partial(\tilde{q}^1, \tilde{q}^2, \cdots, \tilde{q}^N)}{\partial(q^1, q^2, \cdots, q^N)} \neq 0, \tag{2}$$

和

$$\frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^k} \cdot \frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^j} = \delta^i_j. \tag{3}$$

这里 δ^i_j 为 Kronecker 符号. 此处及下面采用 Einstein 求和约定.

定义按以下规律变化[5]:

$$T'^{j_1\cdots j_l}_{i_1\cdots i_m}=\frac{\partial\tilde{q}^{j_1}}{\partial q^{j_1}}\cdots\frac{\partial\tilde{q}^{j_l}}{\partial q^{j_l}}\cdot\frac{\partial q^{i_1}}{\partial\tilde{q}^{i_1}}\cdots\frac{\partial q^{i_m}}{\partial\tilde{q}^{i_m}}T^{j_1\cdots j_l}_{i_1\cdots i_m},\tag{4}$$

的量 $T^{j_1\cdots j_l}_{i_1\cdots i_m}$ 称为 l 阶逆变，m 阶协变的 $k(=l+m)$ 阶混合张量. 上、下角标个数分别表示逆变和协变张量的对应阶.

显然，速度是一个逆变矢量，这是因为 $\dot{\tilde{q}}^i=\frac{\partial\tilde{q}^i}{\partial q^j}\dot{q}^j$. 核形变势能标量 φ 的梯度是一协变矢量，即

$$\tilde{\varphi}(\tilde{q}^1,\tilde{q}^2,\cdots,\tilde{q}^N)=\varphi(q^1,q^2,\cdots,q^N),\tag{5}$$

$$\frac{\partial\tilde{\varphi}}{\partial\tilde{q}^i}=\frac{\partial q^j}{\partial\tilde{q}^i}\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial q^j}.$$

质量参数和粘滞系数用无量纲化的 Werner Wheeler 方法[6]求出.

$$\begin{aligned}m_{ij}&=\frac{3}{4}\int_{z_{\min}}^{z_{\max}}\mathrm{d}z\,p_s^2\left(A_iA_j+\frac{1}{8}p_s^2A_i'A_j'\right),\\ \eta_{ij}&=\frac{1}{4}\int_{z_{\min}}^{z_{\max}}\mathrm{d}z\,p_s^2\left(3A_i'A_j'+\frac{1}{8}p_s^2A_i''A_j''\right),\end{aligned}\tag{6}$$

式中

$$A_i(z,\xi)=p_s^{-2}\frac{\partial}{\partial\xi_i}\int_z^{z_{\max}}\mathrm{d}z'p_s^2(z',\xi).\tag{7}$$

这里 $p_s^2(z,\xi)$ 是柱坐标系中核表面方程，ξ 是一组集体坐标参数.

由此可知，质量和粘滞系数均为二阶协变张量，其变换应满足

$$\tilde{m}_{\lambda\mu}=\frac{\partial q^i}{\partial\tilde{q}^\lambda}\cdot\frac{\partial q^j}{\partial\tilde{q}^\mu}m_{ij},\tag{8a}$$

$$\tilde{\eta}_{\lambda\mu}=\frac{\partial q^i}{\partial\tilde{q}^\lambda}\cdot\frac{\partial q^j}{\partial\tilde{q}^\mu}\eta_{ij}.\tag{8b}$$

而质量的逆矩阵 m^{ik} 是一个逆变张量，且

$$m_{ij}m^{jk}=\delta_i^k.\tag{9}$$

根据张量指标的升降运算法则有，动量 $p_i=m_{ij}\dot{q}^j$ 为一协变矢量.

对核裂变这样一个有势和无势混合的复杂系统的无规扩散过程，其 Lagrange 方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}^i}\right)-\frac{\partial L}{\partial q^i}=-\eta_{ij}\dot{q}^j+g_i^j\Gamma^j(t),\tag{10}$$

式中具有变换不变性的 Lagrangian 是

$$L=\frac{1}{2}m_{ik}\dot{q}^i\dot{q}^k-\varphi(q^1,q^2,\cdots,q^N).\tag{11}$$

可获得 Langevin 方程

$$\dot{p}_i=-\frac{\partial\varphi}{\partial q^i}+\frac{1}{2}\frac{\partial m_{jk}}{\partial q^i}\dot{q}^j\dot{q}^k-\eta_{ij}\dot{q}^j+g_i^j\Gamma^j(t)\tag{12a}$$

$$p_i=m_{ij}\dot{q}^j.\tag{12b}$$

将

$$O = \frac{\partial}{\partial q^i}(m^{jl}m_{jk}) = \frac{\partial m^{jl}}{\partial q^i} m_{jk} + m^{jl}\frac{\partial m_{jk}}{\partial q^i} \tag{13}$$

代入（12a）有

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial \varphi}{\partial q^i} - \frac{1}{2}\frac{\partial m^{jk}}{\partial q^i} p_j p_k - \eta_{ij} m^{jk} p_k + g_i^j \Gamma^j(t), \tag{14a}$$

$$\dot{q}^i = m^{ij} p_j. \tag{14b}$$

无规力函数 $\Gamma^i(t)$ 的系综平均满足

$$\langle \Gamma^i(t) \rangle = 0, \langle \Gamma^i(t)\Gamma^j(t') \rangle = 2\delta^{ij}\delta(t - t'). \tag{15}$$

而文献 [7] 却定义 $\langle \Gamma^i(t)\Gamma^j(t')\rangle = 2m^{ij}\delta(t-t')$，使得 $\Gamma^i(t)$ 成为一个与坐标选取有关的逆变矢量，这违背了它仅是线性空间中的量的性质[2,8]. 噪声强度与粘滞张量之间遵守涨落耗散定理

$$g_i^\mu g_j^\nu = \delta^{\mu\nu}\eta_{ij}T, \tag{16}$$

式中 T 为核温度.

现在研究方程 (14) 的坐标变换规律.

$$\tilde{m}^{ij}\tilde{p}_j = \frac{\partial \tilde{q}^i}{\partial q^\alpha}\frac{\partial \tilde{q}^j}{\partial q^\beta} m^{\alpha\beta}\frac{\partial q^s}{\partial \tilde{q}^j} p_s = \delta^s_\beta \frac{\partial \tilde{q}^i}{\partial q^\alpha} m^{\alpha\beta} p_s = \frac{\partial \tilde{q}^i}{\partial q^\alpha}\dot{q}^\alpha = \dot{\tilde{q}}^i; \tag{17}$$

$$\dot{\tilde{q}}_i = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\partial q^\mu}{\partial \tilde{q}^i} p_\mu\right] = \frac{\partial q^\mu}{\partial \tilde{q}^i}\dot{p}_\mu + \frac{\partial^2 q^\mu}{\partial \tilde{q}^i \partial \tilde{q}^k}\cdot\frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^\alpha} m^{\alpha\nu} p_\mu p_\nu, \tag{18}$$

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \tilde{q}^i} = \frac{\partial q^\mu}{\partial \tilde{q}^i}\cdot\frac{\partial \varphi}{\partial q^\mu}, \tag{19}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{m}^{jk}}{\partial \tilde{q}^i}\tilde{p}_j\tilde{p}_k &= \frac{\partial}{\partial \tilde{q}^i}\left[\frac{\partial \tilde{q}^j}{\partial q^\alpha}\cdot\frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^\beta} m^{\alpha\beta}\right]\frac{\partial q^\mu}{\partial \tilde{q}^j}\cdot\frac{\partial q^\nu}{\partial \tilde{q}^k} p_\mu p_\nu \\
&= \frac{\partial q^s}{\partial \tilde{q}^i}\cdot\frac{\partial m^{\alpha\beta}}{\partial q^s} p_\alpha p_\beta + \left\{\frac{\partial}{\partial \tilde{q}^i}\left[\frac{\partial q^\alpha}{\partial \tilde{q}^j}\right]^{-1}\frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^\beta}\right. \\
&\qquad \left. + \frac{\partial \tilde{q}^j}{\partial q^\alpha}\cdot\frac{\partial}{\partial \tilde{q}^i}\left[\frac{\partial q^\beta}{\partial \tilde{q}^k}\right]^{-1}\right\}\cdot m^{\alpha\beta}\frac{\partial q^\mu}{\partial \tilde{q}^j}\frac{\partial q^\nu}{\partial \tilde{q}^k} p_\mu p_\nu \\
&= \frac{\partial q^s}{\partial \tilde{q}^i}\frac{\partial m^{\alpha\beta}}{\partial q^s} p_\alpha p_\beta - \left[\frac{\partial^2 q^\alpha}{\partial \tilde{q}^i \partial \tilde{q}^j}\cdot\frac{\partial \tilde{q}^j}{\partial q^\alpha} + \frac{\partial^2 q^\beta}{\partial \tilde{q}^i \partial \tilde{q}^k}\cdot\frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^\beta}\right] m^{\alpha\beta} p_\alpha p_\beta.
\end{aligned} \tag{20}$$

调换上式中的哑元指标 α 与 β 及 j 与 k，并考虑到

$$\frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^\alpha} m^{\alpha\beta} = \tilde{m}^{k\beta},$$

可知其后两项相等，并将在方程（14a）中与（18）式的第二项相消.

$$\begin{aligned}
\eta_{ij}\tilde{m}^{jk}\tilde{p}_k &= \frac{\partial q^\alpha}{\partial \tilde{q}^i}\frac{\partial q^\beta}{\partial \tilde{q}^j}\cdot\frac{\partial \tilde{q}^j}{\partial q^\mu}\frac{\partial \tilde{q}^k}{\partial q^\nu}\eta_{\alpha\beta} m^{\mu\nu}\frac{\partial q^s}{\partial \tilde{q}^k} p_s \\
&= \frac{\partial q^s}{\partial \tilde{q}^i}\eta_{\alpha\beta} m^{\beta s} p_s.
\end{aligned} \tag{21}$$

从 (16) 式可看出，对每一上角标 j，g_i^j 的变换象一个协变矢量，而不按二阶张量的规律变化．则

$$\tilde{g}_i^j = \frac{\partial q^s}{\partial \tilde{q}^i} g_s^j, \quad \tilde{\Gamma}^j(t) = \Gamma^j(t), \quad j = 1, 2, \cdots, N. \tag{22}$$

综上所述，Langevin 方程(14)在任意坐标变换下保持形式不变.

选择 m_{ij} 作为协变规度张量的另一优点是：相体积元和分布密度函数 $W(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}, t)$ 均为标量. 按照 Kramers-Moyel 矩展开方法[1]，不难给出与方程(14)等价的具有协变性的 Fokker-Planck 方程.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q^i}(m^{ij} p_j W) + \frac{\partial}{\partial p_i}\left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial q^i} + \frac{1}{2}\frac{\partial m^{jk}}{\partial q^i} p_j p_k + \eta_{ij} m^{jk} p_k\right) W\right] + \eta_{ij} T \frac{\partial^2 W}{\partial p_i \partial p_j}. \tag{23}$$

在本文的框架中，由与坐标有关的动力学系数计算得到的裂变速率反比于时间，所以它应是一个坐标变换不变量，而由标量函数运动动能和库仑斥能组成的裂变碎片动能也为不变量.

3 动力学参数的坐标变换

虽然裂变扩散方程的形式与集体坐标的选取无关，但方程中的系数却按照二阶协变张量的规律变化. 以 $\{c, h, \alpha\}$ 参数[9]作为核表面形状方程. 以对称裂变 ($\alpha = 0$) 为例，三种常用的两参数坐标组合是：(c, h)，(ρ, h) 和 (ρ, b). 这里 ρ 是两碎片质心距，b 为颈部半径. 其中核长度之半 c 和颈部参数 h 是两个基本自由度.

(c, h) 和 (ρ, b) 为独立坐标所给出的两组质量参数矩阵元之间的变换关系，经推导可给出

$$\begin{aligned} M_{\rho\rho} &= A_1^2 M_{cc} + A_2^2 M_{hh} - 2A_1 A_2 M_{ch}, \\ M_{bb} &= A_3^2 M_{cc} + A_4^2 M_{hh} - 2A_3 A_4 M_{ch}, \\ M_{\rho b} &= A_1 A_3 M_{cc} + A_2 A_4 M_{hh} - (A_1 A_4 + A_2 A_3) M_{ch}. \end{aligned} \tag{24}$$

式中

$$A_1 = \frac{\partial b}{\partial h}\Big/\Delta, \quad A_2 = \frac{\partial b}{\partial c}\Big/\Delta, \quad A_3 = \frac{\partial \rho}{\partial h}\Big/\Delta, \quad A_4 = \frac{\partial \rho}{\partial c}\Big/\Delta$$

和

$$\Delta = \frac{\partial \rho}{\partial c}\frac{\partial b}{\partial h} - \frac{\partial \rho}{\partial h}\frac{\partial b}{\partial c}.$$

而质量矩阵元从坐标 (c, h) 向 (ρ, h) 映射的关系为

$$\begin{aligned} M_{\rho\rho}(\rho, h) &= M_{cc}\left(\frac{\partial \rho}{\partial c}\right)^{-2}, \\ M_{hh}(\rho, h) &= M_{cc}\left(\frac{\partial \rho}{\partial h}\Big/\frac{\partial \rho}{\partial c}\right)^2 + M_{hh}(c, h) \\ &\quad - 2M_{ch}\left(\frac{\partial \rho}{\partial h}\Big/\frac{\partial \rho}{\partial c}\right), \end{aligned} \tag{25}$$

$$M_{\rho h}(\rho,h)=M_{cc}\left(\frac{\partial\rho}{\partial h}\right)\bigg/\left(\frac{\partial\rho}{\partial c}\right)^2-M_{ch}\bigg/\frac{\partial\rho}{\partial c}.$$

同样粘滞张量 η_{ij} 也遵守上述坐标变换规律.

图 1 和图 2 分别为选用 (ρ,h) 和 (ρ,b) 坐标，数值计算得到的惯性和粘滞张量矩阵元沿势能极小值路径上随 ρ 的变化. 另外由 (c,h) 参数所给出的各质量和粘滞矩阵元均为关于 ρ 的单调增函数.

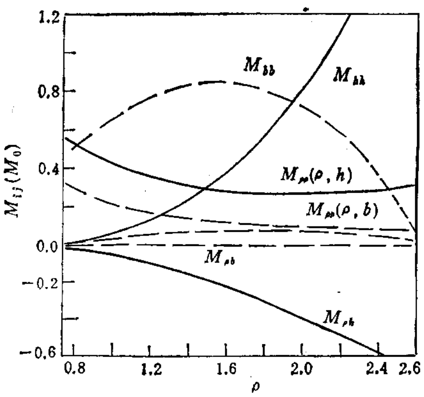

图 1　质量矩阵元随碎片质心距的变化
实线为 (ρ,h)，虚线为 (ρ,b).

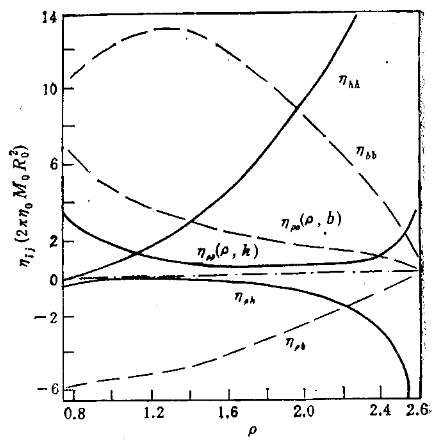

图 2　粘滞矩阵元随碎片质心距的变化
实线为 (ρ,h)，虚线为 (ρ,b).

结果显示出了很好的光滑行为. 由于两种曲线坐标的变换 Jacobian 与集体坐标的选择关系很大，因此裂变扩散方程中的系数的变化规律也将取决于坐标的组合. 比如，仅在 (ρ,h) 空间中，沿核伸长自由度上的质量矩阵元 $M_{\rho\rho}(\rho,h)$ 能够趋于折合质量，与预期的事实相符. 而不是文献 [10] 在分析以两碎片质心距和颈部半径为坐标的 Cassinian、卵形体模型中，沿伸长方向的质量矩阵元并不趋于折合质量的事实时归为："两碎片在到达几何断点前还会强烈的形变".

4　小　　结

裂变 Langevin 方程的协变性要求质量和粘滞系数为二阶协变张量，本文所用的 Werner-Wheeler 方法满足了这一需求. 动力学参数的变化规律取决于集体坐标的组合选取，而模型输出量(如裂变速率，碎片动能和质量分布等)却是坐标变换不变量. 在目前的需要提取相关坐标和内禀自由度的唯象输运理论中，选择一组动力学行为较好的集体坐标是有益的，正如本文所提及的碎片质心距和颈部参数(而不是颈部半径)等.

感谢德国 Hahn-Meitner 研究所的 H. J. Krappe 教授对本工作的建议，及与中国原子能科学研究院的卓益忠研究员和吴锡真副研究员进行过的有益讨论.

参 考 文 献

[1] H. Rishen, The Fokker-Planck Equation (Springer, Heidelberg, 1984).
[2] R. Graham, *Z. Phys.*, **B26** (1977) 397.
[3] H. Grabert et al., *Phys, Rev.*, **A21** (1980) 2136.
[4] 黄祖洽，丁鄂江，输运理论，科学出版社，1987.
[5] «数学手册»编写组,数学手册,高等教育出版社,1979,p452.
[6] K.T. Davies, A.J. Sieres and J.R, Nix, *Phys. Rev.*, **C31** (1976) 2358.
[7] H.J. Krappe, Proc. dynamical aspects of nuclear fission, Smolenice, CSFR 1991, to be published.
[8] C.W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods (Springer-Verlag, 1983).
[9] M. Brack et al., *Rev. Mod. Phys.*, **44**(1972) 320.
[10] H. J. Krappe, Towards a Consistent Description of Particle Evaporation During the Fusion-Fission, 1991.

Covariant Form of the Fission Diffusion Equation

Bao Jingdong

(*Beijing Institute of Meteorology*, 100081)

Received on July 13, 1992

Abstract

The covariant form of the Langevin equation and the Fokker-Planck equation describing the nuclear fission process is studied. The transformations of dynamical parameters are given.

Key Words Nuclear fission, Diffusion equation, Coordinate transformation, Covariance.