

蒙特卡罗方法在原子核模型 理论中的应用*

萨本豪 郑玉明 张孝泽

(中国原子能科学研究院)

一、蒙特卡罗方法要点

蒙特卡罗方法解决问题的基本思想是：设法把问题化成具有随机的性质，然后用大量重复这种随机事件的办法，通过统计各种可能事件的发生数目。而分析出所要求的答案。

譬如物理学中经常碰到的求统计平均值(期望值)的问题

$$\langle A \rangle = \int_{\Omega} A(\underline{x}) f(\underline{x}) d\underline{x} \quad (1)$$

这儿 $\langle A \rangle$ 表示物理量 A 的统计平均值。 \underline{x} 表

示相空间代表点。 $f(\underline{x})$ 是相点所服从的分布密度函数

$$f(\underline{x}) \geq 0, \int_{\Omega} f(\underline{x}) d\underline{x} = 1 \quad (2)$$

Ω 是有关的(考虑的)相空间范围。因相点按 $f(\underline{x})$ 随机决定。故实质上就是个随机问题。可从 $f(\underline{x})$ 抽得代表点 $x_i (i=1, \dots, N)$ ，进而得到 $\langle A \rangle$ 的蒙特卡罗估计值

$$\langle A \rangle^{MC} \simeq \frac{1}{N} A(x_i) \quad (3)$$

从已知分布抽样的方法有多种。如直接法、挑选法和系统法等。以中子在均匀介质

*国家科学基金资助项目。

四、直接的工业应用开始 受人注意

最成熟的是在钢铁工业上的应用，已经几乎无处不用。在钢铁制造过程中用于选矿与分析、烧结、焦炭品质鉴定、硫化铁含量控制、炉渣研究、产品鉴定、相分析。在表面处理过程中用于表面氮化、碳化、硼化、铝化、表面镀层、磨损及硬度、表面注入改性。在腐蚀研究中用于研究腐蚀过程、腐蚀产物、合金化表面。此外还用于研究残余奥氏体、热处理、时效等。

第二位的重要应用于煤、石油和矿石的加工。我国曾用于研究大同煤的矿物分析、苏北油田油层成熟度研究。

另一个重要应用是用于催化。我国有好

几个实验室用于研究氨合成催化剂、费一托催化剂、加氢脱硫催化剂、重整催化剂等，并被鉴定为“取得突破性成果”。

穆斯堡尔谱学应用于提高磁记录材料被认为是“必不可少的手段”，在我国也开始开展。应用于研究黄海和东海大陆架沉积物(海绿石)，以及应用于研究特种玻璃制备，都得到过有关部门的奖励。

参考文献

- [1] U. Gonser, Concluding Remarks, ICA-ME'1987
- [2] 夏元复, 穆斯堡尔谱学的新进展(全文), 第七届全国核物理会议综述报告, 1988
- [3] 夏元复, 穆斯堡尔谱学现状, 核技术, 1988, 将发表
- [4] 徐英庭、李士, 我国穆斯堡尔谱学研究十年进展(1976—1986), 第四届全国穆斯堡尔谱学论文摘要集, 1988

中传播为例,用直接法抽第 n 次碰撞点可如下实现。设第 $n-1$ 次碰撞点为 \vec{x}_{n-1} ,则 \vec{x}_n 可表为

$$\vec{x}_n = \vec{x}_{n-1} + l\vec{\Omega}_{n-1} \quad (4)$$

这儿 l 为此两次碰撞间中子所自由走过的距离, $\vec{\Omega}_{n-1}$ 是第 $n-1$ 次碰撞后中子速度的方向。 l 服从的分布密度函数显然是 $(\Sigma_i$ 是宏观总截面)

$$f(l) = \begin{cases} \Sigma_i e^{-\Sigma_i l}, & \text{当 } 0 \leq l < \infty, \\ 0, & \text{其它,} \end{cases} \quad (5)$$

所谓用直接法抽样品 l_f ,即由下式解 l_f

$$\begin{aligned} \xi &= \int_0^{l_f} f(l) dl = \int_0^{l_f} \Sigma_i e^{-\Sigma_i l} dl \\ &= 1 - e^{-\Sigma_i l_f}, \end{aligned} \quad (6)$$

即

$$l_f = -\frac{\ln(1-\xi)}{\Sigma_i} = -\frac{\ln(\xi')}{\Sigma_i} \quad (7)$$

蒙特卡罗估计值,如 $\langle A \rangle^{MC}$,的误差,近似地是

$$\begin{aligned} \varepsilon &\simeq \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A^2(\underline{x}_i) - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(\underline{x}_i) \right)^2 \right]^{1/2} \\ &= O\left(N^{-\frac{1}{2}}\right). \end{aligned} \quad (8)$$

二、原子核的基态能量

假如描写原子核的模型哈密顿 H 已知,那么从变分原理知道:
基态能量

$$E_0 \leq \int \psi^* H \psi d\tau / \int \psi^* \psi d\tau. \quad (9)$$

用通常变分法做时。就是对一系列试探波函数 ψ_i (含有变分参数),算得相应的 E_i 值

$$E_i = \int \psi_i^* H \psi_i d\tau / \int \psi_i^* \psi_i d\tau, \quad (10)$$

再找其中的极小。当维度很大时,做起来很困难。

用蒙特卡罗方法做,首先要把求 E_i 化成

求平均值的问题;为此令

$$A(\tau) = (H\psi_i)/\psi_i, \quad (11)$$

$$f(\tau) = |\psi_i|^2 / \int |\psi_i|^2 d\tau \quad (12)$$

那么式(10)化为

$$E_i = \langle A(\tau) \rangle = \int A(\tau) f(\tau) d\tau. \quad (13)$$

接着可用Metropolis技巧,对每个代表点 τ_K 。都先相对于前一个代表点 τ_{K-1} 作如下判断

$$\begin{aligned} &\downarrow \\ &\frac{f(\tau_K)}{f(\tau_{K-1})} \stackrel{?}{\geq} 1 \rightarrow \text{否} \rightarrow \xi \stackrel{?}{\leq} \frac{f(\tau_K)}{f(\tau_{K-1})} \rightarrow \text{否} \\ &\text{是} \downarrow \leftarrow \text{是} \downarrow \tau_K^{ac} = \tau_{K-1} \\ &\tau_K^{ac} = \tau_K \quad (k=1, 2, \dots, K) \end{aligned} \quad (14)$$

那么相应的 E_i 估计值为

$$E_i^{MC} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K A(\tau_k^{ac}). \quad (15)$$

为了减少改变变分参数求 E_i 极小值的重复计算,可应用纠偏抽样技巧。若令 $\psi_i(\tau, a_i) \equiv \psi_{ii}$ (这儿第 i 组特定的变分参数 a_i 已显含),那么与 a_i 相应的 $E_i(a_i)$ 可表为

$$\begin{aligned} E_i(a_i) &= \frac{\int |\psi_{ii}|^2 (H\psi_{ii}) / \psi_{ii} d\tau}{\int |\psi_{ii}|^2 d\tau} \\ &= \frac{\int |\psi_{ii}|^2 \left[\left(\frac{H\psi_{ii}}{\psi_{ii}} \right) \frac{|\psi_{ii}|^2}{|\psi_{ii}|^2} \right] d\tau}{\int |\psi_{ii}|^2 \left(\frac{|\psi_{ii}|^2}{|\psi_{ii}|^2} \right) d\tau}, \end{aligned} \quad (16)$$

因此在 a_i 变分参数下用Metropolis方法按

$$f(\tau, a_i) = |\psi_{ii}|^2 / \int |\psi_{ii}|^2 d\tau \quad (17)$$

得到代表点序列之后,在按式(15)计算 $E_i^{MC}(a_i)$ 的同时,可如下计算

$$\begin{aligned} E_i^{MC}(a_i) &= \sum_{k=1}^K A(\tau_k^{ac}, a_i) W(\tau_k^{ac}, a_i) / \\ &\sum_{k=1}^K W(\tau_k^{ac}, a_i), \end{aligned} \quad (18)$$

$$A(\tau_K^{a,c}, a_j) = H\psi_{ij}/\psi_{ii} = H(\tau_K^{a,c})\psi_i(\tau_K^{a,c}, a_j)$$

$$\frac{1}{\psi_i(\tau_K^{a,c}, a_j)}, \quad (19)$$

$$W(\tau_K^{a,c}, a_j) = \frac{|\psi_{ij}|^2}{|\psi_{ii}|^2} = |\psi_i(\tau_K^{a,c}, a_j)|^2 /$$

$$|\psi_i(\tau_K^{a,c}, a_j)|^2. \quad (20)$$

金星南和张孝泽用上述办法算 α 粒子基态能量为 -28.59MeV , 相应的实验值为 -28.296MeV 。

三、蒸发过程的蒙特卡罗计算³⁾

处于激发状态的原子核。单位时间内发射动能在 ε 与 $\varepsilon+d\varepsilon$ 内的粒子 j 的几率

$$p_j(\varepsilon)d\varepsilon = \gamma_j \sigma_c \varepsilon \frac{W(f)}{W(i)} d\varepsilon, \quad (21)$$

对 ε 积分后得相应的总宽度

$$\Gamma_j = \frac{\gamma_j}{W(i)} \int_0^{\varepsilon_{j,\max}} \sigma_c W(f) \varepsilon d\varepsilon, \quad (22)$$

可见问题归结为求：发射粒子可能具有的最大动能 $\varepsilon_{j,\max}$, 原子核能级密度 W 和反过程截面 σ_c 。

假如这些量都有近似办法可算, 那么蒸发过程的蒙特卡罗计算就可如下进行: 按式

(22) 计算各种可能发射粒子的发射几率, 并将其和归一化; 根据归一化后的几率随机决定具体发射粒子的属性(中子, 质子或其它); 由式(21)或它的某种近似抽样发射粒子的动能; 计算剩余核的 A 、 Z 和激发能, 大量重复上述步骤后, 就可以统计等所要求的各种物理量(为分支比、能谱和角分布等)。

四、很热复合核系统破碎的统计描述⁴⁾

中高能重离子反应中形成的高激发(很热)的复合系统。它的退激发机制就不是级

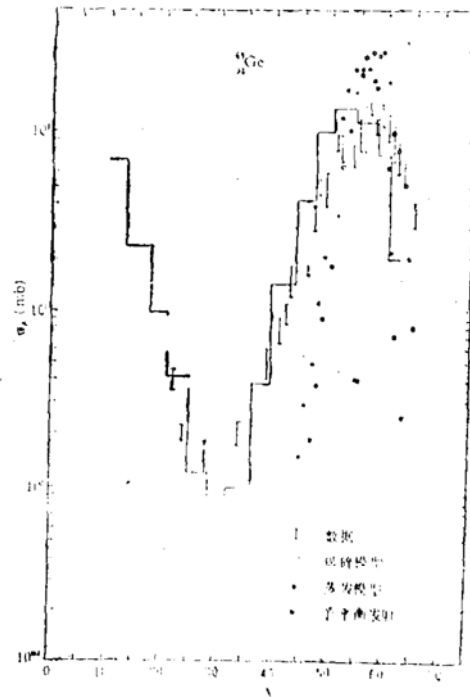


图1. ^{12}C (35MeV/n) + ^{63}Cu 反应的碎块质量分布

联蒸发, 而是复合系统的瞬时破碎

(multifragmentation); 相应的比较成功的理论是平衡统计模型和蒙特卡罗实现技巧。

假如把不同的破碎组态(不同数目的碎块和它们的组成等), 看作不同的系统; 所有这些系统构成一个系综。微正则、正则或巨正则系综。

根据统计物理中相应系综的几率密度分布函数, 用蒙特卡罗方法就可以产生许许多多破碎组态和它们相应的几率; 进而就可以统计出各个感兴趣物理量(为碎块质量分布, 电荷分布等)的相对分布。以与实验相比较。

图1给出了 ^{12}C (35MeV/n) + ^{63}Cu 反应的碎块质量分布数据(误差棒)及其与破碎统计模型(锯齿线)及级联蒸发模型(点)理论结果的比较。可见: 即使在中能重离子反应的低能端。多破碎机制也是重要的。

五、核反应的级联模型和半经典模拟⁵⁾

在以核子—核子碰撞为基础的核内级联

模型中, (1) 核子在靶核和弹核各自静止系中的起始位置, 分别在相应的球内均匀抽样。(2) 核子的起始动量在以费米动量(由局域密度近似决定)为半径的球内均匀抽样, (3) 当两核子接近到 $\sqrt{\sigma_{tot}(\sqrt{s})}/\pi$ 时发生碰撞(s 是核子—核子质心动能), 两次接连的碰撞期间核子作直线运动。运动学是完

全相对论性的。(4) 碰撞后核子的状态。按核子—核子碰撞微分截面随机抽样。(5) 考虑了 Δ 共振, 从而包括了介子自由度。(6) 以碰撞后的态不能是费米海中占有态的方法。考虑了泡里原理。(7) 一般都跟踪到 $t=14\text{fm}/c$ 。亦即核子—核子碰撞数可以忽略时为止。

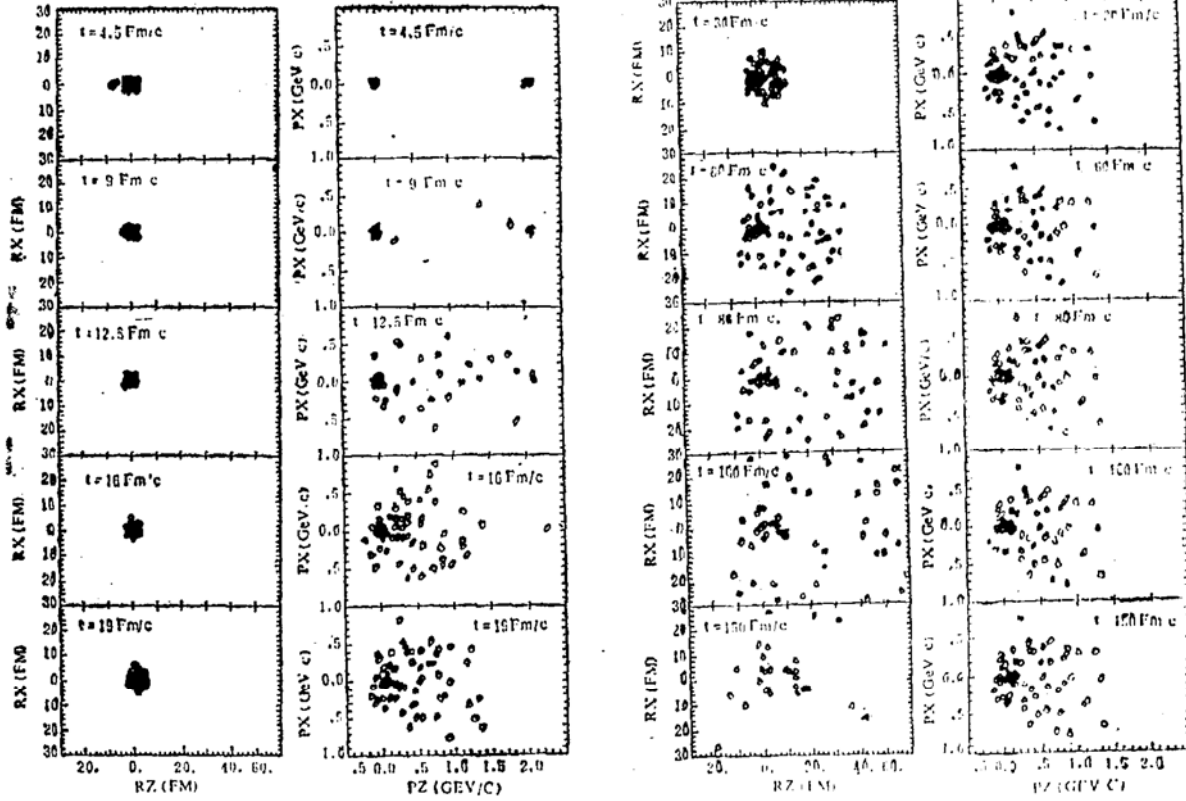


图2. Evolution of nucleon centroids both in the coordinate and momentum spaces for $^{12}\text{C} (25\text{GeV}, b=0.0\text{fm}) + ^{63}\text{Cu}$

我们所设计的中高能重离子反应的半经典模拟(有人称其谓量子分子动力学), 跟上上述核内级联模型的差别在于: (1) 输运过程中, 在相空间内核子不再看作是点粒子。在坐标空间和动量空间都看作具有一定半宽度的高斯分布; (2) 两次接连碰撞期间核子不再是作直线运动, 而是服从平均场的或两体相互作用势的牛顿方程。图2给出了 $^{12}\text{C}(2.083\text{GeV}/n) + ^{63}\text{Cu}$ 反应(中心碰撞)过程的半经典模拟结果: 坐标空间和动量空间核子分布时间发展图。

参考文献

1. 裴鹿成和张孝泽, 蒙特卡罗方法及其在粒

子输运问题中的应用, 科学出版社, 1980

2. K.Binder. Application of the Monte Carlo Method in Statistical Physics. Springer-Verlag 1984

金星南和张孝泽, 计算物理, 1(1984)31

3. L.Dostrovsky, et al, Phys.Rev.116 (1959)683

4. J.Randrop and S.E.Koonin. Nucl. Phys.A356 A356(1981)223

Sa Ben-Hao and D.H.E.Gross, Nucl Phys. A437(1985)643

J.Bondorf et al. Nucl.Phys.A443(1985)321

5. J.Cugnon. Nucl. Phys A387(1982)191

Zheng Yu-Ming et al, Semiclassical dynamics simulation of heavy-ion reactions