

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Андрей Леонидович ЛИТНЕВСКИЙ¹

УДК 539.173(04)

АППРОКСИМАЦИЯ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТИ ДЕЛЕНИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЯДЕР ОТ ВРЕМЕНИ ГЛАДКОЙ ФУНКЦИЕЙ¹

¹ кандидат физико-математических наук, доцент
кафедры электроснабжения промышленных предприятий,
Омский государственный технический университет
a_lit@list.ru

Аннотация

В данной работе рассматриваются основные достоинства и недостатки трех типов моделей деления возбужденных атомных ядер: статистических, динамических и комбинированных. Основное внимание уделяется статистическому моделированию. Одной из основных проблем такого подхода к теоретическим исследованиям процесса деления ядер является некорректный учет релаксационной стадии временной зависимо-

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00379.

Цитирование: Литневский А. Л. Аппроксимация зависимости скорости деления возбужденных ядер от времени гладкой функцией / А. Л. Литневский // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2016. Т. 2. № 2. С. 96–104.

DOI: 10.21684/2411-7978-2016-2-2-96-104

сти скорости деления. Для того чтобы избавиться от этого недостатка статистических моделей, необходим корректный способ аналитического расчета зависимости скорости деления ядер от времени.

В настоящей статье сделан первый шаг к решению этой задачи: предложен метод аппроксимации зависимости скорости деления возбужденных ядер от времени гладкой функцией, построенной на основе функции Вудса-Саксона. Модификация этой зависимости заключается в добавлении параметра, отвечающего за изменение диффузности с течением времени. Подбором этого параметра можно добиться согласия аналитической и динамической зависимостей в области релаксации скорости деления. Вычисление значений параметров аппроксимирующей функции осуществляется методом наименьших квадратов. Дана количественная оценка степени согласованности аппроксимирующей функции с динамической зависимостью.

В заключении работы сформулированы перспективы дальнейших исследований. Использование предложенного в данной работе подхода в статистических моделях деления возбужденных атомных ядер может дать возможность проводить более реалистичное моделирование с меньшими погрешностями.

Ключевые слова

Деление ядер, скорость деления, аппроксимация.

DOI: 10.21684/2411-7978-2016-2-2-96-104

Общеизвестным является тот факт, что теоретические исследования чрезвычайно важны при изучении физики деления ядер. В частности, для исследования процесса деления возбужденных ядер широко применяется компьютерное моделирование. Существуют модели деления нескольких типов: статистические [5; 6], динамические [1; 9; 10] и комбинированные [2; 7; 8]. Остановимся вкратце на достоинствах и недостатках каждого класса моделей.

Статистические модели деления появились первыми. Их идеология заключается в следующем: в начале моделирования процесса деления ядро имеет заданные значения массового и зарядового чисел, полной энергии возбуждения и углового момента. В соответствии с этими начальными параметрами рассчитываются ширины эмиссии частиц и деления, которые определяют вероятность того или иного канала распада. Дальнейшее поведение ядра в большинстве статистических моделей определяется методом Монте-Карло. Преимущество статистических моделей заключается в том, что проведение моделирования с их использованием не требует больших затрат компьютерного времени. Они позволяют получить зависимости, согласующиеся с экспериментальными данными на качественном уровне, однако достаточного количественного согласия наблюдаемых в большинстве случаев нет. Это происходит из-за того, что прежде чем ядра начнут делиться со скоростью, рассчитываемой аналитически на подготовительном этапе моделирования, скорость деления должна выйти на свое квазистационарное значение. Для этого необходимо время, сопоставимое со средним временем деления. В результате того, что релаксация скорости деления не учитывается, ока-

зывается, что при статистическом моделировании ядра «делятся» быстрее, чем это происходило бы в реальности (уменьшается среднее время деления, увеличивается вероятность деления), и при этом испускается меньшее количество частиц (их средние множественности оказываются заниженными).

Динамические модели имеют те же входные параметры, что и статистические, но к ним добавляются параметры, отвечающие за форму ядра. Наиболее существенное отличие динамических моделей от статистических связано с тем, что в них моделируются флуктуации формы ядра. В результате в таких моделях иным образом регистрируется деление, кроме того, в них по-другому учитывается ядерное трение, препятствующее коллективному движению ядерной материи. Использование таких моделей теоретически может позволить получить удовлетворительные значения наблюдаемых, однако полноценное динамическое моделирование неосуществимо практически из-за необходимости огромных затрат компьютерного времени.

Для того, чтобы обойти эту сложность, создаются и используются *комбинированные модели*, которые сочетают в себе свойства статистических и динамических моделей. Рассмотрим модели типа Комбинированной динамическо-статистической модели [8]. Моделирование процесса деления ядра начинается с динамического. Затем при выполнении определенных условий программа, реализующая модель, переходит в статистический режим работы. Динамическая и статистическая ветви модели должны быть согласованы. Для этого необходимо, чтобы скорость деления ядер в статистическом режиме совпадала с динамической квазистационарной скоростью деления, R_{dqs} . Динамическая скорость деления в момент начала моделирования равна нулю, а затем постепенно выходит на свое квазистационарное значение. Это происходит за время порядка 10–100 зс. Среднее время деления ядер может иметь значения до 10^5 зс, времена жизни отдельных нуклидов могут достигать 10^9 зс. Именно наличие таких долгоживущих ядер делает принципиально невозможным полноценное чисто динамическое моделирование. Проводить динамическое моделирование имеет смысл только до момента выхода скорости деления на квазистационарное значение, затем целесообразно переключиться в статистический режим, в котором расчет идет в несколько раз быстрее. Глядя на приведенные выше значения времен деления, можно увидеть, во сколько раз использование комбинированных моделей позволяет сократить время динамического моделирования. Однако и при такой организации модели требуется немало времени для проведения расчетов, особенно если в модель заложено несколько параметров формы ядра. Представляется, что использование статистических моделей с корректным учетом релаксационной стадии процесса деления может дать возможность значительно сократить время расчетов без потери реалистичности и точности модели, что, в свою очередь, позволит в дальнейшем избавиться от значительного количества приближений и допущений, встроенных в существующие сегодня модели для ускорения их работы.

Итак, в настоящей работе мы уделим внимание некоторым аспектам статистического моделирования. Как уже говорилось, одним из основных недо-

статков статистических моделей является фиксированное значение скорости деления ядра на протяжении моделирования процесса его распада. В действительности скорость деления релаксирует от нуля до своего квазистационарного значения по мере протекания процесса деления. Для того, чтобы в какой-то степени скомпенсировать этот недостаток, при статистическом моделировании вводится задержка деления. Это позволяет в некотором приближении решить проблему, но при таком подходе скорость деления ядер в определенный момент времени изменяется скачком, что не делает модель реалистичной. Кроме того, оказывается, что от значения времени задержки существенно зависят результаты моделирования. В настоящей работе будет предложен метод аппроксимации зависимости скорости деления ядер от времени гладкой функцией, использование которого позволит сделать статистическое моделирование более реалистичным.

Для решения поставленной задачи необходимо подобрать такую гладкую функцию, которая бы наилучшим образом могла воспроизвести зависимость скорости деления ядер от времени. В литературе имеется несколько подходов к такой аппроксимации. Они обсуждались в работе [3]. Наиболее точная из описанных там аппроксимаций имеет вид потенциала Вудса–Саксона. Именно такую функцию мы возьмем за основу для построения новой аппроксимации.

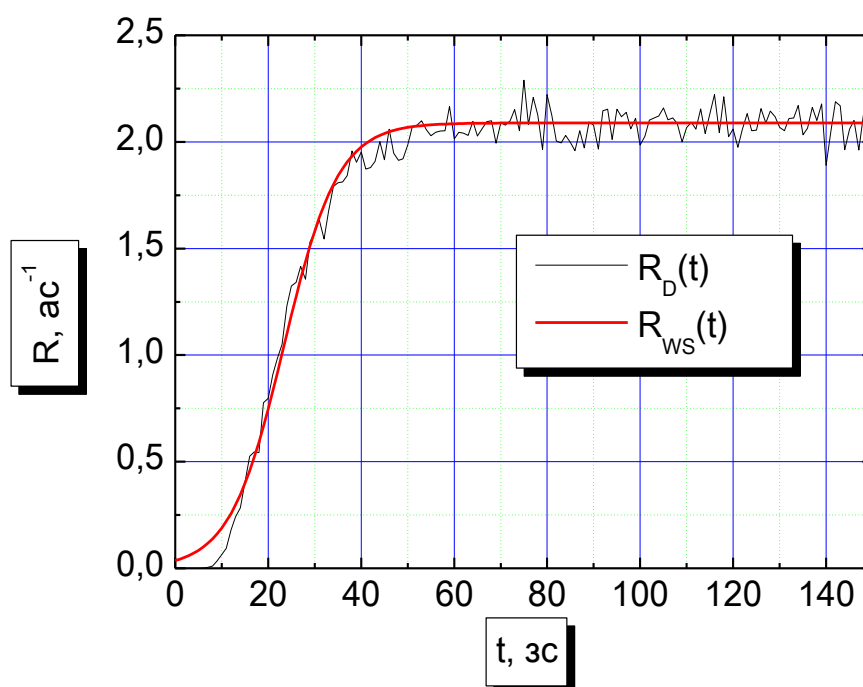


Рис. 1. Аппроксимация зависимости скорости деления от времени функцией Вудса-Саксона

Fig. 1. The approximation of the division speed dependence based on the Woods-Saxon time function

Сравнивать аппроксимирующую функцию мы будем с зависимостью скорости деления от времени, полученной путем динамического моделирования процесса распада ядра платины-190 с начальной энергией возбуждения 150 МэВ. Барьер деления ядра 5,35 МэВ. При расчетах используется система уравнений Ланжевена. Коэффициент затухания 10 зс^{-1} . При моделировании выбран W -потенциал из работы [4]. На Рис. 1 представлена зависимость скорости деления ядер от времени, полученная путем динамического моделирования (R_D , обозначена тонкой линией), и аппроксимация этой зависимости гладкой функцией Вудса-Саксона (R_{WS} , обозначена толстой линией). Хорошо видно, что релаксационная стадия процесса деления не является симметричной, в то время как приведенная аппроксимация обладает этим свойством. Рассмотрим аналитическую запись этой зависимости (1):

$$R(t) = R_{dqs} \left(1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{t-t_{1/2}}{d}\right)} \right). \quad (1)$$

Она имеет три параметра, отвечающих за квазистационарную скорость деления, R_{dqs} , за время, соответствующее половинному значению скорости деления, $t_{1/2}$, и за диффузность функции (скорость возрастания), d . Первый параметр несложно вычислить, усреднив значения скорости деления на квазистационарном участке зависимости. Второй параметр определяется по релаксационному участку зависимости. Для вычисления третьего параметра необходимо использовать метод наименьших квадратов. Впрочем, идеального согласия аппроксимирующей и динамической зависимостей добиться не удастся ввиду симметричности функции Вудса-Саксона. Диффузность реальной (динамической) зависимости оказывается зависящей от времени: она заметно возрастает по мере приближения к квазистационарному участку.

Для того, чтобы учесть этот эффект, предлагается ввести в аналитическую формулу (1) экспоненциальную зависимость диффузности (2), содержащую еще один временной параметр, t_d , отвечающий за изменение диффузности с течением времени:

$$d(t) = d_0 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{t_d}\right) \right). \quad (2)$$

В результате, аналитическая зависимость скорости деления от времени примет вид (3):

$$R(t) = R_{dqs} \left(1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{t-t_{1/2}}{d_0(1-\exp(-\frac{t}{t_d}))}\right)} \right). \quad (3)$$

После проведения динамического моделирования параметры функции подбираются методом наименьших квадратов. Результаты расчетов представлены на Рис. 2. Толстая линия соответствует модифицированной функции Вудса-Саксона, R_{MWS} .

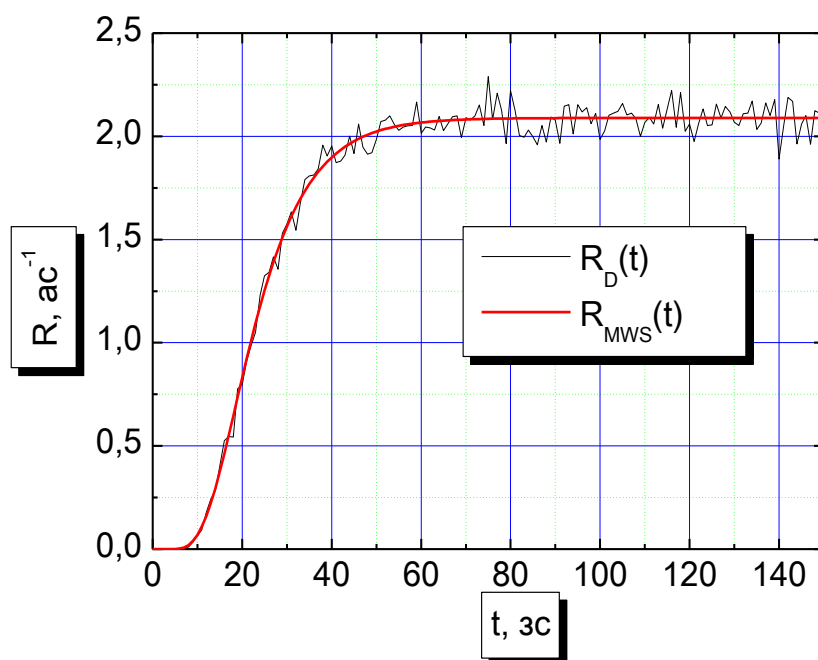


Рис. 2. Аппроксимация зависимости скорости деления ядер от времени функцией Вудса-Саксона с переменной диффузностью

Fig. 2. The approximation of the division speed dependence based on the Woods-Saxon time function with a variable diffusivity

Хорошо видно, что в области релаксационной стадии процесса деления зависимости на Рис. 2 согласуются друг с другом значительно лучше, чем на Рис. 1. Для количественного описания степени согласованности вычислим сумму квадратов отклонений аппроксимирующей функции от динамической зависимости в обоих случаях. Поскольку степень различия этих сумм будет изменяться в зависимости от продолжительности динамического моделирования, а нас в рамках настоящей работы главным образом интересует релаксационная стадия, то при расчете отклонений мы ограничимся началом квазистационарного участка зависимостей (в данном случае — 60 зс). Результаты представлены в Таблице 1. При проведении вычислений шаг дискретизации по времени составлял 1 зс.

Таблица 1

Суммы квадратов отклонений аппроксимирующих функций от динамической зависимости

Table 1

The sum of squared deviations of the approximating functions from the dynamic dependency

	WS	MWS
Сумма квадратов отклонений	0,388	0,130

Расчеты показали, что суммы квадратов отклонений значений аппроксимирующих функций от динамической зависимости в релаксационной области различаются приблизительно в три раза. В случае усовершенствованного подхода к построению аппроксимации согласие заметно лучше.

Таким образом, в настоящей работе представлен подход, позволяющий построить гладкую аппроксимацию зависимости скорости деления ядер от времени, имеющую хорошее согласие с динамической кривой. Исследование влияния условий моделирования процесса деления ядер на параметры аппроксимирующей функции будет служить предметом дальнейших исследований. Решение этой задачи позволит существенно уменьшить погрешности статистического моделирования деления ядер.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Адеев Г. Д. Диффузионная модель формирования распределений осколков деления / Г. Д. Адеев, И. И. Гончар, В. В. Пашкевич, Н. И. Писчасов, О. И. Сердюк // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1988. Т. 19. С. 1229.
2. Адеев Г. Д. Многомерный стохастический подход к динамике деления возбужденных ядер / Г. Д. Адеев, А. В. Карпов, П. Н. Надточий, Д. В. Ванин // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2005. Т. 36. С. 731.
3. Актаев Н. Е. Динамическое и статистическое моделирование процесса деления высоковозбужденных атомных ядер с учетом релаксационной стадии / Н. Е. Актаев, И. И. Гончар // Известия Российской Академии Наук. Серия физическая. 2010. Т. 74. № 4. С. 545.
4. Литневский А. Л. Анализ влияния формы коллективного потенциала в области сплюснутых форм ядра на квазистационарную скорость деления. Поправка к классическим формулам Крамерса / А. Л. Литневский, И. И. Гончар // Вестник Тихоокеанского государственного университета. 2015. № 1 (36). С. 17.
5. Blann M. Computer Codes ALERT I and ALERT II / M. Blann, T. T. Komoto // Lawrence Livermore National Laboratory. 1984.
6. Bohr N. The Mechanism of Nuclear Fission / N. Bohr, J. A. Wheeler // Physical Review. 1939. Vol. 56. P. 426.
7. Chaudhuri G. Precission Neutron Multiplicity and Fission Probability from Langevin Dynamics of Nuclear Fission / G. Chaudhuri, S. Pal // Physical Review C. 2002. Vol. 65.
8. Gontchar I. A C-Code for Combining a Langevin Fission Dynamics of Hot Nuclei with a Statistical Model Including Evaporation of Light Particles and Giant Dipole γ -Quanta / I. Gontchar, L. A. Litnevsky, P. Fröbrich // Computer Physics Communication. 1997. Vol. 107. P. 223.
9. Hasse R. W. Dynamical Model of Asymmetric Fission // Nuclear Physics A. 1969. Vol. 128. P. 609.
10. Tillack G.-R. Two-Dimensional Langevin Approach to Nuclear Fission Dynamics / G.-R. Tillack // Physics Letters B. 1992. Vol. 278. P. 403.

Andrey L. LITNEVSKY¹

**THE APPROXIMATION
OF THE TIME DEPENDENCE
OF EXCITED NUCLEI FISSION RATE
ON THE SMOOTH FUNCTION¹**

¹ Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor,
Department of Power Supply of Industrial Enterprises,
Omsk State Technical University
a_lit@list.ru

Abstract

The paper discusses the main advantages and disadvantages of the three types of excited atomic nuclei fission models: statistical, dynamical, and combined, focusing on statistical modeling. One of the main problems of this approach to the theoretical study of the nuclear process fission is the incorrect consideration of the relaxation stage of the fission rate time dependence. In order to get rid of this disadvantage of the statistical models, it is required to use the correct method of analytical calculation of the time dependence of the nuclear fission rate. The article presents the first step to solving this problem: a method of approximation of the excited nuclei fission rate time dependence by a smooth function based on the Woods-Saxon function. The modification of this dependence consists in adding into its formula a parameter responsible for the change of the diffuseness by time. The selection of this parameter allows to achieve the consent of analytical and dynamic dependencies on the relaxation stage of fission rate. Calculating values of approximating function parameters is carried out by the method of least squares. A quantitative assessment of the consistency of the approximating functions with dynamic dependence is given.

In conclusion, recommendations for further research are formulated. The use of the obtained results in further statistical modeling of excited atomic nuclei fission may allow to conduct a more realistic simulation with fewer errors.

¹ The research has been carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research in terms of the research project no 16-32-00379.

Citation: Litnevsky A. L. 2016. “The Approximation of the Time Dependence of Excited Nuclei Fission Rate on the Smooth Function”. Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, vol. 2, no 2, pp. 96–104.
DOI: 10.21684/2411-7978-2016-2-2-96-104

Keywords

Nuclear fission, fission rate, approximation.

DOI: 10.21684/2411-7978-2016-2-2-96-104

REFERENCES

1. Adeev G. D., Gonchar I. I., Pashkevich V. V., Pischasov N. I., Serdyuk O. I. 1988. "Diffuzionnaya model formirovaniya raspredeleniy oskolkov deleniya" [Diffusion Model of the Distribution of Fission Fragments]. *Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei*, vol. 19, p. 1229.
2. Adeev G. D., Karpov A. V., Nadtochiy P. N., Vanin D. V. 2005. "Mnogomernyy stokhasticheskiy podkhod k dinamike deleniya vzbuzhdennykh yader" [Multidimensional Stochastic Approach to Fission Dynamics of Excited Nuclei]. *Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei*, vol. 36, p. 731.
3. Aktaev N. E., Gonchar I. I. 2010. "Dinamicheskoe i statisticheskoe modelirovanie protsessa deleniya vysokovzbuzhdennykh atomnykh yader s uchetom relaksatsionnoy stadii" [Dynamic and Statistical Modeling of the Process of Fission of Atomic Nuclei Highly Considering the Relaxation Stage]. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*, vol. 74, no 4, p. 545.
4. Blann M., Komoto T. T. 1984. "Computer Codes ALERT I and ALERT II". Lawrence Livermore National Laboratory.
5. Bohr N., Wheeler J. A. 1939. "The Mechanism of Nuclear Fission". *Physical Review*, vol. 56, p. 426.
6. Chaudhuri G., Pal S. 2002. "Prescission Neutron Multiplicity and Fission Probability from Langevin Dynamics of Nuclear Fission". *Physical Review C*, vol. 65.
7. Gontchar I., Litnevsky L. A., Fröbrich P. 1997. "A C-Code for Combining a Langevin Fission Dynamics of Hot Nuclei with a Statistical Model Including Evaporation of Light Particles and Giant Dipole γ -Quanta". *Computer Physics Communication*, vol. 107, p. 223.
8. Hasse R. W. 1969. "Dynamical Model of Asymmetric Fission". *Nuclear Physics A*, vol. 128, p. 609.
9. Litnevskiy A. L., Gonchar I. I. 2015. "Analiz vliyaniya formy kollektivnogo potentsiala v oblasti splyusnutykh form yadra na kvazistatsionarnuyu skorost deleniya. Popravka k klassicheskim formulam Kramersa" [Analysis of the Influence of the Collective Capacity in the Core to Form Flattened Quasi-Stationary Fission Rate. Amendment to Kramers' Classical Formulas]. *Bulletin of Pacific National University*, no 1 (36), p. 17.
10. Tillack G.-R. 1992. "Two-Dimensional Langevin Approach to Nuclear Fission Dynamics". *Physics Letters B*, vol. 278, p. 403.