СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА
Лекция 15 Уравнение Фоккера-Планка.

Образовский Е. Г.

20 декабря 2022 г.

План лекции:

План лекции:

- **Уравнение Фоккера-Планка**

План лекции:

- Уравнение Фоккера-Планка
-

Уравнение Фоккера-Планка

Во многих задачах характерное время изменения функции распределения существенно превышает характерные времена элементарных процессов. При этом влияние внешней среды (термостата) можно разделить на медленную релаксацию к равновесию и быстрые случайные воздействия – "столкновения" с частицами термостата.
Обозначим функцию распределения по переменной x (которую пока не конкретизируем) через $f(x,t)$, нормированную условием

$$\int f(x,t)dx = 1. \tag{1}$$

Уравнение Фоккера-Планка

Функции распределения в два момента времени связаны соотношением

$$f(x, t+\tau) = \int f(x-\Delta, t) w(\Delta, x-\Delta) d\Delta, \qquad (2)$$

где $w(\Delta, x-\Delta)$ – вероятность изменения переменной от значения $x-\Delta$ до значения x за время τ. Если вероятность перехода w быстро убывает с ростом $|\Delta|$, подынтегральное выражение можно разложить, и для малых значений τ получается уравнение

$$\tau \frac{\partial f}{\partial t} \approx -\frac{\partial}{\partial x}\left(f(x,t)\int \Delta w d\Delta\right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(f(x,t)\int \frac{\Delta^2}{2} w d\Delta\right). \qquad (3)$$

Уравнение Фоккера-Планка

Отметим, что в правой части этого уравнения оба члена имеют одинаковый порядок, поскольку величина Δ в общем случае знакопеременная, а в подынтегральном выражении второго члена стоит положительная величина. Окончательно имеем уравнение типа Фоккера – Планка:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x,t)A(x)\right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[f(x,t)B(x)\right], \qquad (4)$$

где

$$A(x) = lim_{\tau\to 0}\frac{\int \Delta w d\Delta}{\tau}, \quad B(x) = lim_{\tau\to 0}\frac{\int \Delta^2 w d\Delta}{2\tau}. \qquad (5)$$

Уравнение Фоккера-Планка

Пример: замедление нейтронов в графите

Найдем стационарное пространственное распределение в зависимости от энергии для точечного источника моноэнергетических нейтронов, замедляющихся в среде в результате упругого рассеяния на ядрах массой $M \gg m$ (m – масса нейтрона). Сечение рассеяния можно считать не зависящим от энергии нейтрона.

Уравнение Фоккера-Планка

Учтем изменение (небольшое) энергии нейтронов при рассеянии на ядрах. В нашем случае мы используем нормировку

$$\int f_0(|\vec{p}|)d^3\vec{p} = \int f_0(\varepsilon)\rho(\varepsilon)d\varepsilon = 1, \tag{6}$$

где $\rho(\varepsilon)$ – плотность состояний, и поэтому уравнение Фоккера – Планка в дивергентном виде, выражающем закон сохранения числа частиц, записывается для функции $f_0(\varepsilon)\rho(\varepsilon)$ и имеет вид

$$\frac{\partial f(\varepsilon,t)\rho(\varepsilon)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial\varepsilon}[f(\varepsilon,t)\rho(\varepsilon)A(\varepsilon)] + \frac{\partial^2}{\partial\varepsilon^2}[f(\varepsilon,t)\rho(\varepsilon)B(\varepsilon)] = -\frac{\partial j_\varepsilon}{\partial\varepsilon}, \tag{7}$$

где плотность потока частиц в энергетическом пространстве j_ε есть

$$j_\varepsilon = f(\varepsilon,t)\rho(\varepsilon)A(\varepsilon) - \frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left[f(\varepsilon,t)\rho(\varepsilon)B(\varepsilon)\right]. \tag{8}$$

Условие обращения j_ε в ноль в тепловом равновесии, когда $f \sim e^{-\varepsilon/T}$, дает связь коэффициентов A и B:

$$\rho(\varepsilon)A(\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left[\rho(\varepsilon)B(\varepsilon)\right] - \frac{\rho(\varepsilon)B(\varepsilon)}{T}. \tag{9}$$

Используя эту связь, уравнение Фоккера – Планка окончательно записывается в виде

$$\frac{\partial f(\varepsilon,t)\rho(\varepsilon)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left[\rho(\varepsilon)B(\varepsilon)\left(\frac{f(\varepsilon)}{T} + \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\right)\right]. \tag{10}$$

Уравнение Фоккера-Планка

Коэффициент A в энергетическом пространстве при рассеянии нейтрона на тяжелых ядрах равен

$$A(\varepsilon) = \int (\varepsilon' - \varepsilon) N_0 v d\sigma(\varepsilon \to \varepsilon')\rangle, \tag{11}$$

где N_0 – число ядер в единице объема; $d\sigma(\varepsilon \to \varepsilon')$ – дифференциальное сечение рассеяния для изменения энергии нейтрона от ε до ε'.

Для вычисления величины $A(\varepsilon)$ рассмотрим столкновение нейтрона массой m с тяжелым покоящимся ядром массой $M \gg m$. Из закона сохранения импульса

$$m\vec{v} = m\vec{v'} + M\vec{V'} \tag{12}$$

получим:

$$V'^2 = \frac{m^2}{M^2}(\vec{v}^2 + \vec{v'}^2 - 2\vec{v}\cdot\vec{v'}) \approx \frac{2m^2}{M^2}v^2(1-\cos\theta). \tag{13}$$

Подставляя в закон сохранения энергии

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{mv'^2}{2} + \frac{MV'^2}{2}, \tag{14}$$

имеем:

$$\delta\varepsilon = \frac{mv'^2}{2} - \frac{mv^2}{2} \approx -\frac{m^2v^2}{M}(1-\cos\theta). \tag{15}$$

Уравнение Фоккера-Планка

Коэффициент A равен

$$A(\varepsilon) = \int (\varepsilon' - \varepsilon) N_0 v d\sigma(\varepsilon \to \varepsilon') \approx -\frac{N_0 \sigma m^2 v^3}{M} = -\frac{m^2 v^3}{M\lambda} \quad (16)$$

где $\lambda = 1/(N_0\sigma)$ – длина свободного пробега нейтрона, Коэффициент диффузии в энергетическом пространстве при рассеянии нейтрона на тяжелых ядрах, имеющих максвелловское распределение по скоростям с температурой T, равен

$$B(\varepsilon) = \frac{1}{2}\langle \int (\varepsilon - \varepsilon')^2 N_0 v d\sigma(\varepsilon \to \varepsilon') \rangle, \tag{17}$$

где $\langle ... \rangle$ означает усреднение по максвелловскому распределению по скоростям ядер, на которых упруго рассеиваются нейтроны (N_0 – число ядер в единице объема); $d\sigma(\varepsilon \to \varepsilon')$ – дифференциальное сечение рассеяния для изменения энергии нейтрона от ε до ε'.

Уравнение Фоккера-Планка

Для вычисления величины $B(\varepsilon)$ рассмотрим столкновение нейтрона массой m с тяжелым ядром массой $M \gg m$. Из закона сохранения импульса

$$m\vec{v} + M\vec{V} = m\vec{v'} + M\vec{V'} \tag{18}$$

получим:

$$V'^2 = V^2 + \frac{2m}{M}\vec{V} \cdot (\vec{v} - \vec{v'}) + \frac{m^2}{M^2}(\vec{v} - \vec{v'})^2. \tag{19}$$

Пренебрегая последним членом при подстановке в закон сохранения энергии

$$\frac{mv^2}{2} + \frac{MV^2}{2} = \frac{mv'^2}{2} + \frac{MV'^2}{2}, \tag{20}$$

имеем:

$$v^2 - v'^2 = \frac{M}{m}(V'^2 - V^2) \approx 2\vec{V} \cdot (\vec{v} - \vec{v'}). \tag{21}$$

Отсюда

$$(\varepsilon - \varepsilon')^2 \approx m^2[\vec{V} \cdot (\vec{v} - \vec{v'})]^2. \tag{22}$$

Усредним это выражение сначала по максвелловской функции распределения f_0 по скоростям ядер:

$$\int (\varepsilon - \varepsilon')^2 f_0 d\vec{V} = m^2 \left(\int V_i V_j f_0 d\vec{V} \right) (\vec{v} - \vec{v'})_i (\vec{v} - \vec{v'})_j = \frac{m^2 T}{M} (\vec{v} - \vec{v'})^2, \tag{23}$$

где $\int V_i V_j f_0 d\vec{V} = \delta_{ij}(T/M)$.

Уравнение Фоккера-Планка

Тогда, считая рассеяние нейтронов на тяжелых ядрах изотропным ($\overline{\cos\theta} \sim m/M \ll 1$) и упругим, получим

$$B(\varepsilon) = \frac{1}{2}\left(\int(\vec{v} - \vec{v}')^2 N_0 v d\sigma\right)\frac{m^2 T}{M} \approx \frac{m^2 T}{M} v^3 \sigma N_0 = \frac{m^2 T v^3}{\lambda M}, \tag{24}$$

где $\lambda = 1/(N_0\sigma)$ – длина свободного пробега нейтрона, не зависящая от его энергии ε.

Рассматривая замедление нейтронов до энергий ~ 1 эВ, диффузией по энергиям можно пренебречь.

Уравнение Фоккера-Планка

Теперь с учетом пространственной диффузии нейтронов уравнение Фоккера – Планка при рассеянии нерелятивистских нейтронов ($\rho(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$) на неподвижных ядрах ($T \to 0$) принимает вид

$$\frac{\partial f(\varepsilon, r, t)}{\partial t} = \frac{\lambda v}{3} \Delta f(\varepsilon, r, t) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \left(\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{\sqrt{\varepsilon} m^2 v^3 f(\varepsilon, r, t)}{\lambda M} \right), \quad (25)$$

Уравнение Фоккера-Планка

Для стационарного распределения с учетом $\lambda = Const$, $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$ получаем:

$$-\frac{\lambda}{3}\sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}\frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2} = \frac{2\sqrt{2m}}{M\lambda}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left(f_0\varepsilon^2\right). \qquad (26)$$

После умножения этого уравнения на $\varepsilon^{3/2}$, имеем:

$$-\frac{\lambda^2}{6}\frac{M}{m}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(\varepsilon^2 f) = \varepsilon\frac{\partial}{\partial\varepsilon}(\varepsilon^2 f). \qquad (27)$$

Уравнение Фоккера-Планка

Вводя обозначения

$$q \equiv \varepsilon^2 f, \quad \tau \equiv \frac{\lambda^2}{6} \frac{M}{m} \ln \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}, \tag{28}$$

где ε_0 – начальная энергия нейтрона, а значение $\varepsilon = \varepsilon_0$ соответствует $\tau = 0$, получаем окончательно уравнение типа теплопроводности:

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 q}{\partial r^2}. \tag{29}$$

Начальному условию при $\tau = 0$ (т. е. $\varepsilon = \varepsilon_0$) $f(\varepsilon_0, r) \sim \delta(r)$ – точечный источник моноэнергетических нейтронов в начале координат – соответствует решение

$$q = A \exp\left(-\frac{r^2}{4\tau}\right). \tag{30}$$

Возвращаясь к исходным обозначениям, имеем:

$$f(\varepsilon, r) = \frac{A}{\varepsilon^2} \exp\left[-\frac{3r^2}{2\lambda^2 (M/m) \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right]. \tag{31}$$

Из этого выражения следует, что вероятность найти нейтрон с энергией ε заметно отлична от нуля на расстояниях, не превышающих

$$r_\varepsilon \sim \lambda \sqrt{\frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}. \tag{32}$$

Уравнение Фоккера-Планка

Вблизи начала координат плотность потока нейтронов в единичном энергетическом интервале $\Phi(\varepsilon)$, равная произведению скорости на плотность числа нейтронов, есть

$$\Phi(\varepsilon) = f(\varepsilon)\rho(\varepsilon)v \sim \frac{1}{\varepsilon^2}\sqrt{\varepsilon}\sqrt{\varepsilon} \sim \frac{1}{\varepsilon}, \qquad (33)$$

что выражает хорошо известный “закон” Ферми.

Уравнение Фоккера-Планка

Естественно, что гауссово распределение устанавливается на расстоянии от источника $r > \lambda$. Однако оно нарушается и на достаточно больших расстояниях, так как там доминируют нейтроны, пролетевшие расстояние r без столкновений, поскольку вероятность этого пропорциональна $\exp(-r/\lambda)$ и спадает гораздо медленнее гауссового распределения. Приравнивая показатели экспонент для этих двух распределений, получаем оценку максимального расстояния от источника, где еще применимо диффузионное приближение:

$$r_{max} \sim \lambda \frac{M}{m} \ln(\varepsilon_0/\varepsilon). \tag{34}$$

Отметим, что $r_{max} \gg r_\varepsilon$ для $M \gg m$, $\varepsilon_0 \gg \varepsilon$.

Приложение

Качественное рассмотрение.

При рассеянии легкой частицы массой m (нейтрона), движущейся со скоростью v, на неподвижной частице массой $M \approx Am$ переданный импульс меняется от нулевого до максимального $\Delta P \approx 2mv$, так что теряемая энергия равна $\Delta\varepsilon \approx (\Delta P)^2/2M \sim (m/M)\varepsilon$.

Уравнение Фоккера-Планка

Тогда для того, чтобы замедлиться от энергии ε_0 до ε, нейтрону потребуется испытать число соударений N, определяемое из соотношения $(1 - m/M)^N \sim \varepsilon/\varepsilon_0$, т. е. $N \sim (M/m)\ln(\varepsilon_0/\varepsilon)$.

Если длина свободного пробега равна λ, то вероятность $P(r)$ оказаться на расстоянии r за N шагов длиной λ в результате случайного блуждания пропорциональна

$$P(r) \sim \exp\left(-\frac{3r^2}{2N\lambda^2}\right) = \exp\left(-\frac{3r^2}{2\lambda^2(M/m)\ln(\varepsilon_0/\varepsilon)}\right).$$

Эта же величина определяет и распределение числа нейтронов по энергии с точностью до предэкспоненциального множителя.

Уравнение Фоккера-Планка

Для количественного описания процесса замедления нейтронов рассмотрим кинетическое уравнение для функции распределения нейтронов $f(\vec{r}, \vec{p})$ по импульсам $\vec{p}$ и координатам $\vec{r}$ в стационарном случае при отсутствии внешних полей:

$$\vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = \int d^3\vec{p}_1 \left[w(\vec{p}, \vec{p}_1) f(\vec{p}_1) - w(\vec{p}_1, \vec{p}) f(\vec{p})\right], \qquad (35)$$

где $w(\vec{p}_1, \vec{p}) d^3\vec{p}_1$ – вероятность рассеяния в единицу времени нейтрона из состояния с импульсом $\vec{p}$ в состояние с импульсом $\vec{p}_1$ в интервале $d^3\vec{p}_1$.

При рассеянии нейтронов на тяжелых ядрах с массой $M \gg m$ относительное изменение энергии нейтрона мало, и если им вовсе пренебречь, то в правой части в интеграле столкновений надо положить $|\vec{p}_1| = |\vec{p}|$. В этом случае вероятность рассеяния $w(\vec{p}_1, \vec{p})$ симметрична относительно перестановки импульсов и интеграл столкновений I_0 принимает вид

$$I_0[f] = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) \left[f(\vec{p}_1) - f(\vec{p})\right]. \qquad (36)$$

Уравнение Фоккера-Планка

Ищем решение кинетического уравнения в виде

$$f(\vec{r},\vec{p}) = f_0(\vec{r},|\vec{p}|) + g(\vec{r},\vec{p}), \tag{37}$$

где f_0 зависит лишь от модуля импульса, и, следовательно, $I_0[f_0] = 0$, а g является малой поправкой. Получающемуся кинетическому уравнению

$$\vec{v}\cdot\frac{\partial f_0}{\partial\vec{r}} = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1,\vec{p})\,[g(\vec{p}_1) - g(\vec{p})] \tag{38}$$

удовлетворяет функция

$$g(\vec{r},\vec{p}) = -\vec{v}\cdot\frac{\partial f_0}{\partial\vec{r}}\tau(|\vec{p}|), \tag{39}$$

где

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1,\vec{p})\,[1-\cos\theta]\,, \tag{40}$$

а θ – угол между импульсами $\vec{p}$ и $\vec{p}_1$. По порядку величины τ – время свободного пробега нейтрона между столкновениями.

Уравнение Фоккера-Планка

Поскольку нас интересует функция распределения нейтронов $f(\vec{r}, \varepsilon)$ по энергиям ε и координатам $\vec{r}$, в кинетическом уравнении (35) нужно усреднить функцию $f(\vec{r}, \vec{p})$ по всем направлениям импульсов:

$$f(\vec{r}, \varepsilon) = \langle f(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} f(\vec{r}, \vec{p}). \tag{41}$$

Тогда при усреднении в левой части кинетического уравнения от члена $\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \rangle$ останется лишь вклад от g:

$$\langle \vec{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}} \rangle = \langle \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(-\tau \vec{v} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \vec{r}} \right) \rangle = -\tau v^2 \frac{\partial^2 f_0}{\partial r_i \partial r_j} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{p_i p_j}{p^2} = $$
$$= -\frac{\tau v^2}{3} \frac{\partial^2 f_0}{\partial r^2}. \tag{42}$$

Уравнение Фоккера-Планка

Представив вероятность перехода в единицу времени $w(\vec{p}_1, \vec{p})d^3\vec{p}_1 = vNd\sigma$, где N – плотность числа рассеивающих нейтроны ядер, $d\sigma$ – дифференциальное сечение рассеяния, выражение для τ можно переписать в виде

$$\tau^{-1}(|\vec{p}|) = \int d^3\vec{p}_1 w(\vec{p}_1, \vec{p}) \left[1 - \cos\theta\right] = \int vNd\sigma \left[1 - \cos\theta\right] = \\ = vN\sigma_{tr} \equiv \frac{v}{\lambda}, \tag{43}$$

где величину $\sigma_{tr} \equiv \int d\sigma \left[1 - \cos\theta\right]$ называют транспортным сечением столкновений, а $\lambda \equiv 1/N\sigma_{tr}$ – длиной свободного пробега нейтрона. Тогда коэффициент диффузии нейтронов D равен $\tau v^2/3 = \lambda v/3$.