非平衡态统计物理导 论

(北京大学研究生教材)

王晓钢

北京大学物理学院

xgwang@pku.edu.cn

非平衡态统计物理学导论

- 1. 导言
 - 1.1 非平衡态统计物理的发展
 - 1.2 等离子体中的非平衡态过程
- 2. Boltzmann 方程与 H 定理
 - 2.1 Boltzmann 方程
 - 2.2 H 定理与熵
 - 2.3 细致平衡原理
 - 2.4 等离子体中的二体碰撞问题
- 3. Brownian 运动与随机扩散过程
 - 3.1 Brownian 运动
 - 3.2 涨落--耗散定理
 - 3.3 Markov 过程
 - 3.4 随机扩散过程

- 4. 近平衡态统计热力学
 - 4.1 Onsager 倒易关系
 - 4.2 Kubo 线性响应理论
 - 4.3 "极化率"的计算
 - 4.4 最小熵产生原理
- 5. 非平衡态等离子体物理过程
 - 5.1 逆 "Landau 阻尼"
 - 5.2 等离子体中的混沌现象
 - 5.3 等离子体中的输运过程

1. 导言

1.1 非平衡态统计物理的发展

平衡态统计力学在 1950 年代就已经发展成熟,但是对于非平衡态统计物理来说,除了"近平衡态"的统计热力学,一直没有成熟的、完整的远离平衡态的理论框架。其主要原因是,当一个系统远离平衡态时,常常是"开放系统",与外界条件有着决定性的联系的。即使是在"近平衡态",也没有一个如平衡态统计力学那样基于仅仅一个"各态历经"假设的统一、简洁的理论。

非平衡态统计物理几乎是与平衡态统计物理一起发展起来的。先驱性的工作,就是著名的 Boltzmann 方程。正是这个方程,导致了物理学家几个世纪以来关于微观可逆性(细致平衡定理)和宏观不可逆性(H 定理与熵的引入)的争论。

早期研究工作中的宏观不可逆性主要体现在"趋向平衡"的过程,并发展出"近平衡态"的统计物理学理论,或者更严格地说:"线性的"非平衡态统计物理。其中最成功的是 Onsager 倒易关系和 Kubo 线性响应理论。其中 Onsager 倒易关系是"细致平衡定理"的"宏观"体现——在线性近似下,非平衡态体系的 Onsager 倒易关系体现的是"零阶近似",即所要趋近的平衡态的特性。 Kubo 线性响应理论体现的实际上同样的物理本质:对一个体系进行扰动使之偏

离平衡态,在线性扰动的范围里,系统对扰动的响应和扰动强度成正比,这个比例系数反映的是体系本身的(平衡态)特性。或者说,Onsager 倒易关系描述已经离开平衡态的体系"自由地"(在自由能驱动下)趋向平衡的过程;而 Kubo线性响应理论描述平衡态的体系"受迫"地(在扰动能量驱动下)偏离平衡的过程。归根结底,都是所谓"流"(flux)和"力"(force)之间的关系。而 Flux是描述物理体系中、乃至不同(如物理、化学、生物)体系之间输运过程的基本"物理量"(广义的)。所以基于这些理论,发展起来了研究输运过程的各种方法。

另一方面,很多人相信解开微观可逆性和宏观不可逆性矛盾的关键在于对随机过程的了解。

对于随机过程的研究,最重要的贡献应该是 Einstein 提出相对论理论的同时发展起来的 Brownian 运动理论。这个理论得到的所谓"涨落一耗散定理"将微观物理量的涨落与宏观的耗散联系起来,是非平衡态统计物理的基石之一。在 Einstein 的 Brownian 运动理论提出的"迁移率"的概念基础上,描述非平衡态体系的"形式理论"(formal theory)也发展起来。主要的代表是所谓 Master Equation (主方程)。这些理论可以很好地(至少在理论上)描述各种随机过程。

本质上, Brownian 运动理论与前面说的线性响应理论是密切相关的——线性响应理论得到的"输运系数"就是微观物理量的"涨落谱"所决定的。

1969 年 Prigogine 与 Brussels 学派提出远离平衡态的"耗散结构理论" (Dissipative structures theory),在 1977 年获得 Nobel 奖并得到进一步发展和应用。同时发展起来的还有 Haken 的所谓"协同学"(Synergetics)。而 1980 年代,"混沌"(Chaos)的理论曾一度在非平衡态统计物理与湍流研究领域独领风骚。

当代非平衡态统计物理学的核心问题依然是如何解释微观可逆性与宏观不可逆性之间的矛盾。但主流的研究工作已经逐渐转向已有的各种理论模型对各种复杂系统(特别是生命与社会系统)的应用。另一方面,没有一个统一的理论框架仍然是困扰非平衡态统计物理学家的主要问题。

我们这门课程侧重于简介已经发展成熟的非平衡态统计物理理论与方法,并 应用于等离子体物理中的有关问题。同时也介绍这些方法对各种复杂体系的应用。

这个教程也可以作为等离子体物理研究人员的参考书。

1.2 等离子体中的非平衡态过程

等离子体是典型的非平衡态。

多数情况下(除热等离子体外),等离子体中的电子温度和离子温度相差很

大,整体来说是远离平衡的体系。当然,我们可以把等离子体中的电子和离子分别看成处于热力学平衡的"子系统"。等离子体的"双流体"理论就是基于这样的模型。即使是动理学理论,也可以对电子和离子分别进行平衡态统计力学描述。因此,一般我们说的等离子体中的非平衡态统计物理过程,是指电子和离子在其各自的"热力学平衡态"附近的"近平衡态"过程,特别是各种输运过程。

在这门课程中,我们重点讨论的非平衡态等离子体物理过程主要是等离子体中的(微观)碰撞和(宏观)输运。

一般认为,粒子间的相互碰撞是输运现象的微观过程。但是在等离子体中,由于长程的电磁相互作用及大量运动模式的存在,波对带电粒子的散射成为输运过程的重要原因——在很多情况下,甚至是主要原因。因此导致"反常"的输运、耗散。这也是非平衡态等离子体物理所要研究的重点之一。

2. Boltzmann 方程与 H 定理

2.1 Boltzmann 方程

基于"气体是由大量相互作用的粒子构成的"这一模型,非平衡态统计物理学的先驱 Ludwig Boltzmann 在19世纪下半叶发展起来了描述微观粒子在速度空间的分布函数满足的方程: Boltzmann 方程。

这个方程的推导见于统计物理的教科书。我们在这里直接给出最后的结果: 速度分布函数 $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ 满足的方程

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{\delta f}{\delta t} \bigg|_{C} , \qquad (2.01a)$$

其中的 Boltzmann 碰撞项

$$\frac{\delta f}{\delta t}\bigg|_{c} \equiv \iint d\mathbf{v}_{1} d\Omega \Lambda(f_{1}'f' - f_{1}f), \qquad (2.01b)$$

这里的 $d\Omega$ 是碰撞立体角元, Λ 是碰撞散射截面。这就是著名的 Boltzmann 积分一微分方程。在推导这个方程时,我们假设了: 1)二体碰撞(忽略了三体及多体相互作用与关联,Boltzmann 用的是"稀薄气体"); 2)短程相互作用——Boltzmann 用的是"刚球模型"; 3)"分子混沌性"——碰撞过程中两个粒子的分布是是相互独立的,即碰撞过程只与双粒子的分布 $f_{12} = f_1 f_2 + G_{12}$ 中的 $f_1 f_2$ 有关,而与粒子间的关联无关。

这个方程对于物理学的发展有极其重要的意义:

第一,基于这个方程得到的 H 定理,从微观"第一性原理"定义了"熵",证明了热力学第二定律;第二,H 定理及熵定义引进的 Boltzmann 常数,第一次把微观世界和宏观世界联系起来(10⁻²³!当然这个常数的估计是后来由 Planck 完成的);第三,由微观的可逆的物理定律得到了宏观的不可逆的 H 定理(热力学第二定律),第一次明确揭示了其中的矛盾!

关于 Boltzmann 方程和 H 定理的研究一直在进行着。2010 年的 Fields 奖 颁给了法国数学物理学家 Cédric Villani, Citation 就是:

"For his proofs of nonlinear Landau damping and convergence to equilibrium for the Boltzmann equation."

而 Villani 最主要的贡献就是:

Villani, together with his collaborators Giuseppe Toscani and Laurent Desvillettes, developed the mathematical underpinnings needed to get a rigorous answer, even when the gas starts from a highly ordered state that has a long way to go to reach its disordered, equilibrium state. His discovery had a completely unexpected implication: though entropy always increases, sometimes it does so faster and sometimes slower.

可见 Boltzmann 方程和 H 定理研究的重要性。

2.2 H 定理与熵

Boltzmann 方程的最重要的贡献是通过 H 定理证明了热力学第二定律——发展的时间箭头。而热力学第二定律不仅在物理学和自然科学中,而且在社会科学领域里也有重要应用。我们下面就来证明 H 定理。

Boltzmann 在 1872 年引进这样一个 H 函数:

$$H = \iint d\mathbf{x} d\mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \ln f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad . \tag{2.02}$$

将这个 H 函数对时间求全微分,并利用 Boltzmann 方程,并假设积分域的边界时绝热的,我们得到下面的关系式:

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{4} \iint d\mathbf{x} d\mathbf{v} d\mathbf{v}_1 \Lambda d\Omega (f_1' f' - f_1 f) (\ln f_1' f' - \ln f_1 f) . \tag{2-03}$$

因为被积函数的两个因子 $(f_i'f'-f_if)$ 和 $(\ln f_i'f'-\ln f_if)$ 的符号总是相同的,所以总有

$$\frac{dH}{dt} \le 0 \quad . \tag{2-04}$$

这里等号只有在 $f'_if' = f_if$ 的情况下成立。

这就是著名的 H 定理: 在孤立体系中,分布函数的辩护总是使得 H 函数减小,除非体系已经达到这样一种平衡状态——分子间的碰撞不再引起分布函数的变化。

从 H 定理可以知道, H 函数具有描述系统演化时间箭头的性质, 即具有"熵"的性质。通过与热力学熵的比较, Boltzmann 得到在第一性原理意义上的"熵"的定义:

$$S = -k_B H = -k_B \iint d\mathbf{x} d\mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \ln f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$$
(2.05)

从H定理,显然有

$$\frac{dS}{dt} = -k_B \frac{dH}{dt} \ge 0 , \qquad (2.06)$$

即热力学第二定律。这个定义将热力学第二定律放在了坚实的分子运动论基础上。而且后人将这一定义推广到其它物理系统甚至广泛的多自由度系统,都是适用的——直接推动了其它科学领域以及信息论的发展。

2.3 细致平衡原理

H 定理和热力学第二定律的微观第一性原理证明引起物理学界的争论: 既然 Boltzmann 方程具有宏观不可逆性质,那么作为其出发点的微观物理规律的可逆性呢?

细致平衡原理告诉我们 Boltzmann 方程的微观可逆性:

$$f_1'f' = f_1f$$
 (2.07)

也就是说,如果dt时间段的元碰撞引起的分布函数变化

$$\delta f^{(c)} = f_1 f \Lambda d\Omega d\mathbf{x} dt d\mathbf{v} d\mathbf{v}_1$$

与相同时段反元碰撞引起的分布函数变化

$$\delta f^{(i)} = f_1' f' \Lambda d\Omega d\mathbf{x} dt d\mathbf{v} d\mathbf{v}_1$$

相等,则我们说体系处于"细致平衡"状态。而这个状态就是平衡态。即体系达到平衡状态的充分必要条件是达到"细致平衡"——这就是细致平衡原理。

从细致平衡原理出发,我们可以推导出孤立的稀薄气体系统的平衡分布——Boltzmann 分布。

对(2-07)取对数,有

$$\ln f_1' + \ln f' = \ln f_1 + \ln f$$
, (2.08)

即分布函数的对数 ln *f* 是碰撞过程中可线性叠加的守恒量。则其一定是碰撞过程中基本守恒量:总粒子数(为一常数)、粒子动量、粒子能量的线性叠加:

$$\ln f = \alpha_0 + \alpha_1 \cdot m\mathbf{v} + \alpha_2 \left(\frac{1}{2}mv^2 + U(\mathbf{x})\right), \tag{2.09}$$

或写成

$$f = C_0 \exp\left\{C_2 \left(\frac{1}{2}m(\mathbf{v} - \mathbf{c}_1)^2 + U(\mathbf{x})\right)\right\} .$$
 (2.10)

由粒子数密度、流体速度、和温度的定义我们可以确定常数,得到

$$f = n_0 e^{-U(\mathbf{x})/k_B T} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left\{ \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2}{2k_B T} \right\} .$$
 (2.11)

不难证明,这里流体速度 \mathbf{v}_0 和温度 T 可以是位形空间坐标的函数: $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_0(\mathbf{x})$, $T = T(\mathbf{x})$ 。

2.4 等离子体中的二体碰撞问题

在多数情况下等离子体可以近似地看成"稀薄的"电离气体、甚至"无碰撞"的 Vlasov "气体",但是在一些"慢尺度"过程(如输运过程)中,等离子体中的二体碰撞还是很重要的。特别是在未来长脉冲、甚至"稳态"放电的托卡马克(如 EAST、ITER)等离子体中,输运过程是影响能量约束的主要因素之一。

所以有非常重要的研究意义。因为带电粒子之间长程 Coulomb 相互作用,导致等离子体动理学中碰撞项的具体形式有与 Boltzmann 的"刚球模型"不同的碰撞截面。我们在这里介绍几种不同条件下等离子体的二体碰撞项。

2.4.1 Krook 碰撞项

这是描述碰撞过程的最简单的一种方法。其物理思想非常简洁:认为系统偏离平衡并不远,一次碰撞就使得系统基本达到热力学平衡态。

碰撞引起的分布函数变化的定义是:

$$\frac{\delta f}{\delta t}\bigg|_{C} = \left[\frac{f(t+\Delta t) - f(t)}{\Delta t}\right]_{C}$$
 (2.12)

在平衡态附近、"平稳"条件下可以近似地有

$$\left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{c} = -\frac{f - f_0}{\tau_c} \equiv -\nu_c (f - f_0) \, . \tag{2.13}$$

这里, f_0 是热力学平衡态分布, τ_c 是"弛豫时间"。显然,如果 $\tilde{f} = f - f_0$ 是对平衡分布 f_0 的偏离,有 $d\tilde{f}$ / $dt = -v_c\tilde{f}$,即 $\tilde{f} \sim e^{-v_c t}$ 。这就是为什么我们称 τ_c 是弛豫时间。我们也称 τ_c 是"碰撞时间"(即两次碰撞间隔的时间),因为一般来说,经过一次碰撞就可以达到"局域"热力学平衡。所以 v_c 是"碰撞频率"。

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\right) \tilde{f}_{\alpha} - \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \nabla \Phi \cdot \frac{\partial f_{0\alpha}}{\partial \mathbf{v}} = -v_{c} \tilde{f}_{\alpha}, \qquad (2.14)$$

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{x}, t) = -4\pi \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int d\mathbf{v} \tilde{f}_{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) .$$
 (2.15)

后者是自洽场满足的 Poisson 方程。在均匀无穷大假设下,用 Fourier 变换(即

 $\tilde{f} = \tilde{f}_{\omega \mathbf{k} \alpha} e^{-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$)容易得到

$$-i\left(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}\right) \tilde{f}_{\omega k \alpha} - i \frac{q_{\alpha} \Phi_{\omega k}}{m_{\alpha}} \mathbf{k} \cdot \frac{\partial f_{0\alpha}}{\partial \mathbf{v}} = -v_{c} \tilde{f}_{\omega k \alpha}, \qquad (2.14a)$$

$$k^{2}\Phi_{\omega\mathbf{k}} = 4\pi \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int d\mathbf{v} \tilde{f}_{\omega\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \,. \tag{2.15a}$$

将(2.14a)

$$\tilde{f}_{\omega \mathbf{k}\alpha} = -\frac{q_{\alpha} \Phi_{\omega \mathbf{k}}}{m_{\alpha}} \frac{k \partial f_{0\alpha} / \partial u}{\omega - ku + iv_{\alpha}}$$

带入(2.15a),可以得到色散关系

$$1 - \sum_{\alpha} \frac{\omega_{p\alpha}^2}{k^2} \int du \frac{dF_{0\alpha} / du}{u - (\omega + iv_c) / k} = 0 .$$
 (2.16)

这里

$$F_{0\alpha}(u) \equiv \frac{1}{n_{0\alpha}} \iint dv dw f_{0\alpha}(u, v, w),$$

u 是速度在 k 方向的分量, $n_{0\alpha}$ 是平均粒子数密度, $\omega_{p\alpha} \equiv (4\pi n_{0\alpha}q_{\alpha}^2/m_{\alpha})^{1/2}$ 是等离子体频率。对于 Vlasov-Poisson 等离子体, $v_c = 0$,(2.16)式的积分在波的相速度 $u = \omega/k$ 处有一个奇点。正是这个奇点引起了 Landau 阻尼。很明显,碰撞将这个奇点从实轴上移到复平面的上半平面 $u = (\omega + i v_c)/k$ 处——成为这个积分的一阶极点。我们可以得到一个具有 $e^{-v_c t}$ 因子的指数衰减解,即整个分布函数在 τ_c 的时间里弛豫到热力学平衡态。

2.4.2 Fokker-Planck 碰撞项

碰撞过程引起的分布函数变化(2.12)还可以写成

$$\left. \frac{\delta f}{\delta t} \right|_{c} = \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \quad . \tag{2.12a}$$

借助 Einstein 的 Brownian 运动理论(我们在后面会详细讨论),引入在t时刻

粒子经过 Δt 的时间由速度 $\mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}$ "迁移"到速度 \mathbf{v} 的概率 $P(\mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}, \Delta \mathbf{v})$,即假定这是一个 Markov 过程,有

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t + \Delta t) = \int d(\Delta \mathbf{v}) P(\mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}, \Delta \mathbf{v}) f(\mathbf{x}, \mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}, t)$$
(2.17)

可知 $P(\mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}, \Delta \mathbf{v})$ 满足:

$$\int d(\Delta \mathbf{v}) P(\mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}, \Delta \mathbf{v}) = 1 \mathbf{o}$$

记

$$\langle \Delta \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\Delta t} \int d(\Delta \mathbf{v}) (\Delta \mathbf{v}) P(\mathbf{v}, \Delta \mathbf{v}) ,$$

$$\langle \Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{\Delta t} \int d(\Delta \mathbf{v}) (\Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v}) P(\mathbf{v}, \Delta \mathbf{v}) ,$$
....;

在小角度散射下可以将 (2.17) 对 Δv 做 Taylor 展开, 保留二次项。利用 (2.12a) 以及

$$P(\mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}, \Delta \mathbf{v}) f(\mathbf{v} - \Delta \mathbf{v}, t) = P(\mathbf{v}, \Delta \mathbf{v}) f(\mathbf{v}, t) +$$

$$+ \left[-\Delta \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} + \Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} : \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right] P(\mathbf{v}, \Delta \mathbf{v}) f(\mathbf{v}, t) + \dots,$$

容易得到

$$\frac{\delta f}{\delta t}\bigg|_{f} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left(\frac{\langle \Delta \mathbf{v} \rangle}{\Delta t} f\right) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left(\frac{\langle \Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} \rangle}{\Delta t} f\right). \tag{2.18}$$

这个结果是一种"形式解",最早是 Einstein 在研究 Brownian 运动时得到的。问题成为如何进一步计算"动理学摩擦" $\langle \Delta \mathbf{v} \rangle / \Delta t$ 和速度空间的"动理学扩散系数" $\langle \Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} \rangle / \Delta t$ 。(参见秦宏《等离子体中的碰撞问题》讲义。)

2.4.3 Rosenbluth 碰撞项

对于带电粒子间的 Coulomb 碰撞,Rosenbluth 计算了这两个系数,得到

$$\frac{\left\langle \Delta \mathbf{v} \right\rangle}{\Delta t} = \Gamma \frac{\partial H(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}} \quad , \qquad \frac{\left\langle \Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} \right\rangle}{\Delta t} = \Gamma \frac{\partial^2 G(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v} \partial \mathbf{v}} \quad .$$

即

$$\frac{\delta f}{\delta t}\bigg|_{C} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left(\Gamma f \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} H(\mathbf{v}) \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2}}{\partial \mathbf{v} \partial \mathbf{v}} : \left(\Gamma f \frac{\partial^{2}}{\partial \mathbf{v} \partial \mathbf{v}} G(\mathbf{v}) \right). \tag{2.19}$$

其中 $\Gamma = 4\pi q^2 q_T^2 \ln \Lambda / m^2$, $\ln \Lambda$ 是所谓 Coulomb 对数, $\Lambda = 3k_B T \lambda_D / Ze^2$, λ_D 是

Debye 屏蔽半径;而 Rosenbluth 势函数

$$H(\mathbf{v}) \equiv \frac{m + m_T}{m} \int d\mathbf{v}' \frac{f(\mathbf{v}')}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|} ,$$

$$G(\mathbf{v}) \equiv \int d\mathbf{v}' |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| f(\mathbf{v}') \quad \bullet$$

这里下标T代表"试验粒子"(test particle)。

2.4.4 Landau 碰撞项

1936 年,Landau 直接利用 Coulomb 碰撞截面代替刚球模型计算等离子体中带电粒子间的小角度(同样也是计算到 $\Delta v \equiv v' - v$ 的二阶项)二体碰撞,得到 Landau 碰撞项

$$\frac{\delta f_1}{\delta t}\bigg|_{C} = \frac{\Gamma}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \int d\mathbf{v}_2 \frac{\partial^2 |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|}{\partial \mathbf{v}_1 \partial \mathbf{v}_1} \bigg[\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} - \frac{m_1}{m_2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_2} \bigg] f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) . \tag{2.20}$$

容易证明,Landau 碰撞项与 Rosenbluth 是等价的。但是 Landau 碰撞项得到的更早一些。

【作业】2.1: 试由(2.16)式求具有 $e^{-\nu_c t}$ 因子的指数衰减解。

【作业】2.2: 试由(2.18)式推导 Rosenbluth 碰撞项(2.19)或 Landau 碰撞项(2.20)。

3. Brownian 运动与随机扩散过程

3.1 Brownian 运动理论

Brownian 运动的研究是最后奠定原子论的基石之一。

早在古罗马时代(大约公元 60 年),著名哲学家 Lucretius 的科学长诗《De Rerum Natura》(翻译成英文是《On the Nature of Things》)就有过关于尘埃粒子的 Brownian 运动的粗浅描述(作为"原子"存在的证据之一)。这应该是最早的关于 Brownian 运动的描述。【西方哲学从一开始就有基于对现象实际观察的所谓"原子论"的学说,这与东方哲学基于思辨认为"一尺之捶,日取其半,万世不竭"有本质上的不同。】

3.1.1 Brownian 运动

而 Brownian 运动得名于苏格兰植物学家 Robert Brown 在 1827 年对花粉 在水中的运动的观测,尽管早在 1784 年一位荷兰科学家就发现了炭粉尘埃颗粒的无规则运动。

最早在理论上研究 Brownian 运动的是一位丹麦数学、天文学家 Thorvald N. Thiele。他在 1880 年发表了一篇关于最小二乘法的论文第一次利用数学工具去寻找 Brownian 运动的规律。后来,法国的数学家 Louis Bachelier 于 1900 年在他的博士学位论文《The theory of speculation》中独立地建立了 Brownian

运动的理论模型,提出了多股票和期货市场的随机过程分析方法。这也被认为是金融数学的创立。而 Albert Einstein(1905)和 Marian Smoluchowski(1906)分别独立地在物理上建立了 Brownian 运动的理论模型。这个模型的成功间接地证实了原子和分子的存在,并进一步将热力学定律更稳固地放在基于动理学的统计物理基础之上。

Brownian 运动的基本物理现象是:

- 1) 悬浮在液体中的颗粒做无规运动;
- 2) 其对初始位置的均方根偏离与测量时间的平方根成正比。

Einstein 的理论从热力学出发,得到"涨落—耗散定理";然后引进"迁移概率"的概念,得到后来被称为"Fokker-Planck"方程结果。最后得到悬浮在液体中的颗粒对初始位置的均方根偏离与测量时间的平方根成正比的结果,解释了Brown 的观测。

后来著名的法国物理学家、数学家 Paul Langevin(朗之万)在 1908 年论文《Sur la the 'orie du mouvement brownien》(英译稿《On the Theory of Brownian Motion》)从 Stokes 定律出发,写出著名的描述统计无规运动的"朗之万方程",利用我们现在广泛使用的"平均"与"起伏"的概念,直接计算了布朗粒子对初始位置的均方根偏离,得到了爱因斯坦理论同样的结果。这个工作比起爱因斯坦的理论,物理上更直观,简洁。所以朗之万方程及其发展的方法在物理学甚至其它科学的很多领域都有广泛的应用。

3.1.2 Brownian 运动的 Einstein 模型 迁移率

我们先介绍 Brownian 运动的 Einstein 模型理论。为了讨论 Brownian 运动的性质,Einstein 假设这是一个无规行走问题。设f 是悬浮粒子的分布,如果在时间间隔 τ 里粒子位置变化为 Δ ,则在 τ 时刻落在区间(Δ , $\Delta+d\Delta$)的粒子数为

$$df = fP(\Delta)d\Delta, \qquad (3.17)$$

可以得到

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\Delta) d\Delta = 1, \qquad P(-\Delta) = P(\Delta) . \tag{3.18}$$

这里的 $P(\Delta)$ 就是"迁移概率"。如果把粒子位置变化 Δ 推广为相空间位置的变化,则对一个相空间分布函数 f(X,t) (这里的 X 可以是位形空间坐标,也可以是相空间坐标),其在 $t+\tau$ 时刻处于 X 到 X+dX 的分布是

$$f(X,t+\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(X-\Delta,t)P(\Delta)d\Delta .$$
 (3.19)

如果时间间隔τ很小,则

$$f(X,t+\tau) = f(X,t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t}$$
 o

进一步有

$$f(X + \Delta, t) = f(X, t) + \Delta \frac{\partial f}{\partial X} + \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial X^2} + \dots$$

代入(3.19)式,则有

$$f(X,t) + \tau \frac{\partial f}{\partial t} =$$

$$= f \int_{-\infty}^{+\infty} P(\Delta) d\Delta - \frac{\partial f}{\partial X} \int_{-\infty}^{+\infty} \Delta P(\Delta) d\Delta + \frac{\partial^2 f}{\partial X^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2} P(\Delta) d\Delta + \dots, \qquad (3.20)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial X^2}, \qquad (3.21)$$

其中"扩散系数"

$$D = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta^2}{2\tau} P(\Delta) d\Delta \, . \tag{3.22}$$

上面的讨论与前面关于 Fokker-Planck 碰撞项的讨论是一致的。

这个扩散方程(3.22)显然有特征解

$$f(X,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{X^2/4Dt}$$
 (3.23)

可以计算出其均方根位移

$$\sqrt{\left\langle X^{2}\right\rangle }=\sqrt{2Dt} \ . \tag{3.24}$$

如果这里的 X = x 是位形空间的位置,则这个结果就是 Brownian 运动观测得到的均方根位移与时间的平方根成正比。这个理论模型解释了 Brownian 运动的观测结果,间接证实了原子分子论的物理图像。

3.1.3 Brownian 运动的 Langevin 模型

我们在这里再介绍 Langevin 的理论模型。

从 Stokes 定律出发,考虑 Brownian 粒子受到液体分子碰撞引起的"拖拽力" $-\mu$ V (μ 是拖拽系数)和分子热运动引起的随机碰撞的作用,我们得到 Langevin Equation(朗之万方程)

$$M\frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\mu\mathbf{V} + \mathbf{F}(t)$$
, (或写成 $\frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\gamma\mathbf{V} + \mathbf{f}$) (3.25)

其中 $\mathbf{F}(t)$ 是随机力。广义地,这个方程的右边可以都写成与随机相互作用有关的形式(其实"拖拽力"本身就是微观随机相互作用"平均"后"残留"下来的那部分),或者 $\mathbf{F}(t)$ 把分成确定和随机的两部分。这样的方程则成为"广义朗之万方程"。

方程(3.25)中 Brownian 粒子的运动速度 V = dX/dt,而 X = X(t) 是 t 时刻 Brownian 粒子的空间位置,用 X 乘以方程(3.25),有

$$\mathbf{X} \cdot \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\gamma \mathbf{X} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{X} \cdot \mathbf{f} , \Rightarrow$$

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} X^2 - V^2 = -\frac{1}{2} \gamma \frac{d}{dt} X^2 + \mathbf{X} \cdot \mathbf{f} . \tag{3.26}$$

这里已经用到

$$\mathbf{X} \cdot \mathbf{V} = \mathbf{X} \cdot \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} X^2$$
, $\frac{d}{dt} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{V}) = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} X^2 = \mathbf{X} \cdot \frac{d\mathbf{V}}{dt} + V^2$

对(3.26)做统计平均,得到

$$\frac{1}{2}\frac{d^2}{dt^2}\langle X^2\rangle - \langle V^2\rangle = -\frac{1}{2}\gamma\frac{d}{dt}\langle X^2\rangle + \langle \mathbf{X}\cdot\mathbf{f}\rangle \quad . \tag{3.27}$$

为了求解这一具有统计随机性的物理过程,Langevin 提出的基本假设是:

- 1) Brownian 粒子受到液体分子碰撞作用是无规的热碰撞,即对随机力的统计平均 $\langle \mathbf{F} \rangle = 0$;
 - 2) 粒子位置与无规碰撞作用力之间统计独立,即 $\langle \mathbf{X} \cdot \mathbf{f} \rangle = 0$;
- **3**)Brownian 粒子与液体分子间达到热平衡,即 $M\langle V^2\rangle/2=k_BT/2$ (为简单起见,我们只考虑一维运动)。

则(3.27)可以写成

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle X^2 \rangle + \gamma \frac{d}{dt} \langle X^2 \rangle = \frac{2k_B T}{M} . \tag{3.28}$$

我们可以容易得到 Brownian 运动的 Langevin 解

$$\frac{d}{dt}\left\langle X^{2}\right\rangle = \frac{2k_{B}T}{\mu} + \gamma X_{0}^{2}e^{-\gamma t}$$
(3.29)

这里 X_0^2 是 Brownian 粒子的初始均方位移。Brownian 运动的 Langevin 解 (3.29) 的长时间行为是

$$\left\langle X^{2}\right\rangle =\frac{2k_{B}T}{\mu}t.$$
 (3.30)

即测到的均方根位移与测量时间的平方根成反比

$$\sqrt{\left\langle X^{2}\right\rangle }=\sqrt{2k_{B}Tt/\mu }\sim \sqrt{t} \ . \tag{3.31}$$

这个结果与 Einstein 理论得到的结果(3.24)是一致的,解释了 Brownian 运动的观测结果。

因为朗之万方程(广义上就是 Newton 第二定律中的力包含"随机相互作用")的物理直观性,可以直接计算"粒子"的随机运动轨迹的"平均",所以可以利用"物理直观"来描述很多随机过程。比如用这个方程及其发展的方法计算湍流和随机过程的关联。更多的应用可以参考如: W. Coffey, Yu. P. Kalmykov, J. T. Waldron,《The Langevin Equation: with Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry, and Electrical engineering》,World Scientific, 2004。

3.2 涨落一耗散定理

3.2.1 扩散系数的 Einstein 理论

Brownian 运动的 Einstein 模型得到 $\sqrt{\langle X^2 \rangle} = \sqrt{2Dt}$ 。这里的扩散系数 D 与那些物理量有关呢?

Einstein 首先从热力学出发,假设 ρ 是悬浮粒子的密度,则在动力学平衡下 $\rho = \rho(X)$ 使得对于悬浮粒子位置 X 的任意变分 δX 有自由能的变分

$$\delta F = \delta E - T \delta S = 0; (3.32)$$

这里E是悬浮粒子的内能,即如果假设关于X的对称性,以及系统被约束在 X=0与X=L之间,有

$$\delta E = -\int_{0}^{L} K \rho(X) \delta X dX . \qquad (3.33)$$

而

$$\delta S = -\int_{0}^{L} \frac{k_{B}}{n} \frac{\partial \rho}{\partial X} \delta X dX , \qquad (3.34)$$

这里n是水溶液的密度;有

$$K\rho = \frac{k_B T}{n} \frac{\partial \rho}{\partial X}$$
, $K\rho - \frac{\partial p}{\partial X} = 0$ (3.35)

可见K是单个悬浮粒子受到的水溶液的某种作用力,这种力与溶液对悬浮粒子的"渗透压"p达到动力学平衡。根据 Kirchhoff, Lectures on Mechanics,可以知道动力学平衡时这个力K就是粘滞系数为v的溶液对半径为 r_0 ,速度为 $K/6\pi v r_0$ 的悬浮"颗粒"的"拖拽力"。则从(3.35)可以得到单位时间通过某

 $-X = X_0$ 截面的悬浮粒子数为

$$\frac{K\rho}{6\pi\nu r_0} - \frac{k_B T}{6\pi\nu r_0 n} \frac{\partial \rho}{\partial X} = 0 . \tag{3.36}$$

其第二项正是悬浮粒子数沿 $X=X_0$ 方向的"扩散" $-D\partial\rho/\partial X$ 。于是有粒子"扩散"系数

$$D = \frac{k_B T}{6\pi v r_0 n} = \frac{k_B T}{\mu}$$
 (3.37)

这里 μ 是拖拽系数。这与 Langevin 的结果(3.30)是相同的。

3.2.2 涨落--耗散定理

方程(3.31)及(3.37)中的"扩散系数"

$$D = k_B T / \mu, \qquad (3.38)$$

其中 μ 是表征系统微观分子的"涨落"引起的粘滞(或者摩擦),即 Brownian 粒子的扩散过程是由于液体分子的涨落过程引起的阻尼过程。而阻尼本质上是耗散过程。关系式(3.38)将涨落与耗散过程联系在一起,所以被称为"涨落—耗散定理"。

一般地,任何一组热力学量 $\{\xi\}$ 对平衡的涨落 $\langle \Delta\xi\Delta\xi \rangle$ 可以写成

$$\left\langle \Delta \xi \Delta \xi \right\rangle = k_B \left[\frac{\partial^2 S}{\partial \xi \partial \xi} \right]_0^{-1} \equiv \frac{k_B}{D_{\xi \xi}}$$
 (3.39)

的形式。其中下标"0"表示系统的热力学平衡态,S则是系统的熵,而 $D_{\xi\xi}$ 则是"扩散系数"。这个关系可以看成是涨落—耗散定理的一般热力学表示。

对于近平衡态统计物理学,经常可以用到这个定理的各种形式。例如,由准

线性的静电扰动理论可以得到带电粒子在速度空间的"扩散"系数

$$D^{QL} = \text{Re}\left[\left(\frac{e}{m_e}\right)^2 \sum_{k} \frac{i |E_k|^2}{\omega_k - k\upsilon}\right]$$
 (3.40)

(具体推导见《高等等离子体物理(II)》。)这是涨落—耗散定理的一个典型例子: 带电粒子在速度空间的"扩散"(耗散过程)系数与系统的扰动静电"涨落谱" $|E_{k}|^{2}$ 成正比。

3.3 Markov 过程

3.3.1 Markov 定理与中心极限定理

从 Brownian 运动的 Einstein 分析认为这种类型的运动是一个典型的无规行走问题。最简单而又普遍的系统描述无规行走问题的理论是 Markov 理论。即把 Brownian 粒子的无规行走看成一个 Markov 过程来分析。

Markov 过程理论基于下面两个主要定理:

Markov 定理:

N 步无规行走的位置概率密度的 Fourier 系数 $w_N(\mathbf{k})$ 等于每步无规行走的位置概率密度的 Fourier 系数 $\tau_i(\mathbf{k})$ 的乘积:

$$w_N(\mathbf{k}) = \prod_{i=1}^N \tau_i(\mathbf{k}) \, \mathbf{o} \tag{3.41}$$

中心极限定理:

如果 N 很大,则有:

1) 总的均方位移是每一步均方位移的 N 倍;

$$\langle X^2 \rangle = N \langle x^2 \rangle$$
; (3.42)

2) 其位置概率密度

$$W_N(\mathbf{X}) = \left(\frac{3}{2\pi \langle X^2 \rangle}\right)^{3/2} e^{-\frac{3X^2}{2\langle X^2 \rangle}} . \tag{3.43}$$

3.3.2 迁移概率与 Markov 扩散

在(3.41—42)中,如果我们写 $N \equiv \nu(t-t')$,满足t > t';其中 ν 是粒子"迁移率"。则,得到"扩散系数"

$$D = \frac{v}{6} |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2$$
 (3.44)

代入(3.43),有因为粒子迁移而形成的位置概率密度——迁移概率

$$W_{N}(\mathbf{X}) \Rightarrow$$

$$\psi(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \left(\frac{1}{4\pi D(t-t')}\right)^{3/2} e^{-\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}{4\pi D(t-t')}};$$
(3.45a)

以及

$$W(\mathbf{x},t) = \int d\mathbf{x}' \psi(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') W(\mathbf{x}',t') .$$
 (3.45b)

这就是 Einstein 的理论分析的(3.23)。

如果这个过程是 Markov 过程,则有

$$\psi(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \psi(\mathbf{x}',t';\mathbf{x},t)$$
(3.46)

或者说:"正碰撞"和"逆碰撞"造成的位置迁移的概率相等。

显然,从前面 Brownian 运动的 Einstein 理论分析我们已经知道,迁移概率(3.45a)是扩散方程

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')}{\partial t} = D\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t')$$

的解。则由(3.45b)式,我们可以得到位置概率 $W(\mathbf{x},t)$ 也满足扩散方程

$$\frac{\partial W(\mathbf{x},t)}{\partial t} = D\nabla^2 W(\mathbf{x},t) \, . \tag{3.47}$$

3.3.3 速度迁移概率与 Fokker-Planck 方程

我们现在利用 Markov 过程的扩散性质和迁移概率的概念来讨论速度空间的扩散过程。

从 Brownian 运动的朗之万方程

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\gamma \mathbf{V} + \mathbf{f} \tag{3.25}$$

出发,我们可以形式地得到这个方程的解

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_0 e^{-\gamma t} + \int_0^t d\tau e^{-\gamma (t-\tau)} \mathbf{f}(\tau),$$

并得到所谓"长期解"

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} - \mathbf{V}_0 e^{-\gamma t} = \int_0^t d\tau e^{-\gamma(t-\tau)} \mathbf{f}(\tau) \cdot \mathbf{0}$$
(3.48)

从这个"长期解"我们可以定义速度迁移概率

$$\psi(\tau;t) \equiv e^{-\gamma(t-\tau)}$$
(3.49)

由中心极限定理,我们得到速度空间的"位置"概率密度

$$W(\mathbf{U}) = \left(\frac{3}{2\pi \langle U^2 \rangle}\right)^{3/2} e^{\frac{-3U^2}{2\langle U^2 \rangle}}.$$
 (3.50)

而这里的均方"位移"显然是

$$\langle U^{2} \rangle = \langle \left(\mathbf{V} - \mathbf{V}_{0} e^{-\gamma t} \right)^{2} \rangle$$

$$= \iint d\tau d\tau' \langle \psi(\tau) \mathbf{f}(\tau) \psi(\tau') \mathbf{f}(\tau') \rangle$$

$$= \iint d\tau d\tau' \psi(\tau) \psi(\tau') \langle \mathbf{f}(\tau) \mathbf{f}(\tau') \rangle$$

$$= \iint d\tau d\tau' \psi(\tau) \psi(\tau') \gamma^{2} D \delta(\tau - \tau')$$

$$= \gamma^{2} D \int_{0}^{t} d\tau \psi^{2}(\tau) = \frac{\gamma D}{2} \left(1 - e^{-2\gamma t} \right) . \tag{3.51}$$

这里用到了"随机力" $\mathbf{f}(\tau)$ 具有 Gaussian 概率分布形式的假设。即其关联函数

$$\langle f_i(\tau) f_j(\tau') \rangle = 2\lambda k_B T \delta_{ij} \delta(\tau - \tau') = \gamma^2 D \delta(\tau - \tau')$$

则(3.50)可以写成

$$W(\mathbf{V},t) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T \left(1 - e^{-2\gamma t}\right)}\right)^{3/2} e^{-\frac{m|\mathbf{V} - \mathbf{V}_0 e^{-\gamma t}|^2}{2k_B T \left(1 - e^{-2\gamma t}\right)}}$$
(3.52)

显然,其长时间行为即为 Maxwellian 分布; 弛豫时间则为 $1/\gamma$ 。

对(3.52)作微分运算,得到,

$$\frac{\partial W}{\partial t} = 3\gamma W + \gamma \mathbf{V} \cdot \frac{\partial W}{\partial \mathbf{V}} + \gamma^2 D \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{V}^2}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{V}} \cdot (\gamma \mathbf{V} W) + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{V}^2} (\gamma^2 D W) \circ$$
(3.53)

这个方程被称为 Fokker-Planck 方程。显然(3.52)是 Fokker-Planck 方程的 Green 函数解。对比(2.18),显然有

$$\gamma {f V}
ightarrow - rac{\left< \Delta {f v}
ight>}{ au}$$
 , $\gamma^2 D
ightarrow rac{\left< \Delta {f v} \Delta {f v}
ight>}{2 au}$.

这就是为什么我们称(2.18)右边第一项为"摩擦力",第二项为"速度空间扩散"。

3.3.4 随机热扩散过程

一般地,一个随机的扩散过程可以有下述形式的方程来描述:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \alpha(t)\mathbf{V} \cdot \frac{\partial W}{\partial \mathbf{X}} + \tilde{\gamma}(t)W = D\frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{X}^2},$$
(3.54)

其中 $\tilde{\gamma}(t)$ 是一种"随机相互作用", $\left\langle \tilde{\gamma}(t) \right\rangle = 0$ 。在其随机作用下,分布W可以分成两部分: $W = W_0 + \tilde{W}$ 。有 $W_0 \equiv \left\langle W \right\rangle$, $\left\langle \tilde{W} \right\rangle = 0$ 。将(3.54)对快时间尺度平均,得到

$$\frac{\partial W_0}{\partial t} + \alpha \mathbf{V} \cdot \frac{\partial W_0}{\partial \mathbf{X}} + \left\langle \tilde{\gamma}(t)W \right\rangle = D \frac{\partial^2 W_0}{\partial \mathbf{X}^2},$$
(3.55)

将(3.55)从(3.54)中减去,可以得到

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} + \alpha \mathbf{V} \cdot \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{X}} + \left(\tilde{\gamma}(t)W - \left\langle \tilde{\gamma}(t)W \right\rangle \right) = D \frac{\partial^2 \tilde{W}}{\partial \mathbf{X}^2} . \tag{3.56}$$

在"对冲假设"下,直接忽略 $\left(\tilde{\gamma}(t)W-\left\langle \tilde{\gamma}(t)W\right\rangle \right)$ 项,得到关于 \tilde{W} 的方程

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} + \alpha \mathbf{V} \cdot \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{X}} = D \frac{\partial^2 \tilde{W}}{\partial \mathbf{X}^2};$$
(3.57)

或者利用 $\left\langle \tilde{\gamma}(t)W\right\rangle = \left\langle \tilde{\gamma}(t)\tilde{W}\right\rangle$, $\tilde{\gamma}(t)W - \left\langle \tilde{\gamma}(t)W\right\rangle = \tilde{\gamma}(t)W_0 + \tilde{\gamma}(t)\tilde{W} - \left\langle \tilde{\gamma}(t)\tilde{W}\right\rangle$,在"准线性近似下,忽略高阶起伏项 $\tilde{\gamma}(t)\tilde{W} - \left\langle \tilde{\gamma}(t)\tilde{W}\right\rangle$,得到

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} + \alpha \mathbf{V} \cdot \frac{\partial \tilde{W}}{\partial \mathbf{Y}} + \tilde{\gamma}(t) W_0 = D \frac{\partial^2 \tilde{W}}{\partial \mathbf{Y}^2} . \tag{3.56}$$

这两种方法都被用来研究随机"热"扩散问题。

【作业】3.1: 试由(3.45)式推出初始概率

$$W(\mathbf{X}',t') = \delta(\mathbf{X}' - \mathbf{X}_0)\delta(t' - t_0)$$

条件下任意时刻的概率分布。这在物理上对应"扩散"过程。试叙述: 初始的 δ - 函数分布是怎样扩散的?

【作业】3.2:利用我们得到的速度迁移概率,试由(3.48)式推出(3.53)式; 并解释其物理意义。

4. 近平衡态统计热力学

"近平衡态"统计热力学(严格地应称为"线性非平衡态统计热力学")是非平衡态统计物理中发展得最完善的部分。Onsager 倒易关系和最小熵产生定理被认为是近平衡态统计热力学的主要基石。这一章里我们首先介绍 Onsager 倒易关系和线性响应理论及其应用,然后简述最小熵产生定理。

4.1 Onsager 倒易关系

我们把描述"趋向平衡"过程的热力学量分为两类:"驱动"的"力"(一般是梯度的形式:可以是外部驱动,也可以是体系自身的"自由能") $\{X_i\}$,和响应这种驱动而产生的"流" $\{J_i\}$,比如电场和电流、温度梯度和热流、密度梯度和粒子流等。则在"线性非平衡态"条件下,这两类热力学量之间应该满足如下关系:

$$J_i = L_{ij}(\mathbf{X} = 0)X_j$$
 (4.01)

这就是为什么我们称"近平衡态"统计热力学为"线性非平衡态统计热力学"。 这里我们已经用了 Einstein 记号,即对重复下标求和: $\sum_j L_{ij} X_j \to L_{ij} X_j$ 。可以证明,系数矩阵 L_{ij} 具有对称性

$$L_{ij} = L_{ji}$$
 (4.02)

这个对称关系我们称为 Onsager 倒易关系 (Onsager Reciprocal Relations)。 这个关系的证明需要一些新的物理概念。我们会在以后的章节里逐步引进这些概念。

这个关系是微观可逆性在宏观不可逆的输运过程中的体现!数学上看,在线性理论中两个一阶量之间的比例系数一定是零阶量;物理上,则揭示了在趋向平衡的过程中,系数矩阵 L_{ij} 是平衡态性质的体现。对外部驱动来说——系统是处于平衡态,"响应"导致对平衡态的偏离,所以"响应"系数揭示了系统本身"固有"的性质;对内部梯度引起的"自由能"驱动来说,初始梯度(自由能)是对平衡态的偏离,所以"输运"系数揭示了系统本身"固有"的性质。一般用 Onsager 倒易关系描述后一类问题,而把前一类问题归结到线性响应问题。

4.2 Kubo 线性响应理论

我们前面说到,线性响应理论在物理本质上与 Onsager 倒易关系是相似的——只是一个是"驱动"过程,另一个是"自由能"释放的过程,与等离子体中的驱动过程和不稳定性过程很类似。

我们先来介绍一下 Kubo 发展起来的线性响应理论。

在 **1950** 年代,**Green** 和 **Kubo** 几乎同时证明了:如果J 是对外部驱动 X^e 的 线性响应,用有外部驱动条件下的(**4.01**)式表达

$$J_i = L_{ij}(\mathbf{X}^e = 0)X_j^e$$
, (4.03)

则可以计算出,系数矩阵

$$L_{ij}(\mathbf{X}^{e}=0) = \frac{1}{k_{B}T} \int_{0}^{\infty} dt \left\langle J_{i}(0)J_{j}(t) \right\rangle_{\mathbf{X}^{e}=0} \, . \tag{4.04}$$

这里的 $\left\langle J_i(0)J_j(t)\right\rangle$ 是 $J_i(0)$ 和 $J_j(t)$ 之间的自关联。在趋向平衡过程(如 **2.4.1** 小节研究的过程)中,有

$$\int_{0}^{\infty} dt \left\langle J_{i}(0)J_{j}(t) \right\rangle_{\mathbf{X}^{e}=0} \approx \tau_{c} \left\langle J_{i}(0)J_{j}(0) \right\rangle_{\mathbf{X}^{e}=0} = \tau_{c} \left\langle J_{j}(0)J_{i}(0) \right\rangle_{\mathbf{X}^{e}=0}$$
(4.05)

即 Onsager 倒易关系。这里用到了对具有 Gaussian 分布的响应,其关联函数

$$\langle J_i(t)J_j(t')\rangle = \tau_c \langle J_i(t)J_j(t)\rangle \delta(t-t'),$$
 (4.06)

其中 τ。是相关时间。

当然,线性响应理论有广泛的应用,很多学校是作为专门的课程来教授。我们不打算进一步展开,只是在这里讨论把等离子体作为连续电磁介质图像下的电动力学中的线性响应理论方法——"极化率"(susceptibility)张量的计算。

4.3 极化率的计算

线性响应理论的核心是计算与系数矩阵 $L_{ij}(\mathbf{X}^e=0)$ 成正比的所谓的"广义极化率"张量 $\chi_{ij}(\mathbf{X}^e=0)$ 。

$$\mathbf{J}_{\omega \mathbf{k}} = \sum_{\alpha} n_{\alpha 0} q_{\alpha} \int d^{3} \upsilon \mathbf{v} \tilde{f}_{\alpha \omega \mathbf{k}}(\mathbf{v}) \approx -n_{e 0} e \int d\mathbf{v} \mathbf{v} \tilde{f}_{e \omega \mathbf{k}}(\mathbf{v}) .$$
 (4.06)

而从分布函数满足的 Vlasov 方程 (无碰撞项), 我们得到

$$-i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \tilde{f}_{e\omega \mathbf{k}}(\mathbf{v}) = \frac{e \mathbf{E}_{\omega \mathbf{k}}}{m_e} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}},$$

即

$$\tilde{f}_{e\omega\mathbf{k}}(\mathbf{v}) = \frac{ie}{m_e(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{E}_{\omega\mathbf{k}} \, . \tag{4.07}$$

代入(4.06)可以得到

$$\mathbf{J}_{\omega \mathbf{k}} \approx -n_{e0} e \int d\mathbf{v} \frac{i e \mathbf{v}}{m_{e} (\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})} \frac{\partial f_{0}}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{E}_{\omega \mathbf{k}} \equiv \ddot{\mathbf{\sigma}}_{\omega \mathbf{k}} \cdot \mathbf{E}_{\omega \mathbf{k}} \qquad . \tag{4.08}$$

这里电导率张量有并矢的形式

$$\ddot{\mathbf{\sigma}}_{\omega \mathbf{k}} = -\frac{i\omega_{pe}^2}{4\pi} \int d\mathbf{v} \frac{\mathbf{v}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} . \tag{4.09}$$

得到极化率矩阵

$$\ddot{\mathbf{\chi}}_{\omega \mathbf{k}} = \frac{4\pi i}{\omega} \ddot{\mathbf{\sigma}}_{\omega \mathbf{k}} = \frac{\omega_{pe}^2}{\omega} \int d\mathbf{v} \frac{\mathbf{v}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{v}} . \tag{4.10}$$

给定平衡分布 $f_0(\mathbf{v})$ (如 Maxwellian 分布), 可以利用 Plemji 公式

$$\frac{1}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} = \frac{1}{\omega - ku} = P \frac{1}{\omega - ku} - \frac{i\pi}{k} \delta(u - \omega/k),$$

将这个积分计算出来(其中P为主值积分算子)。

4.4 最小熵产生定理

最小熵产生定理是线性非平衡态统计力学的另一块基石。其表述为:系统处于稳定的非平衡定态时($\partial/\partial t=0$),熵产生取最小值。

非平衡定态的典型例子是温差金属棒模型:在金属棒两端保持确定的温度 T_1 和 T_2 ,会形成一个不随时间改变的温度分布。这时系统处于稳定的定态,熵产

生 P_s 取最小值。——最小熵产生定理。这个定理的意义在于:说明在平衡态附近的定态具有一种"势"函数。如同对平衡态来说,自由能 F 取极小值一样,靠近平衡态,熵产生最小可作为定态的判据。但是这个定理也告诉我们:不能期望在稳定的非平衡定态附近有新的结构。所以,更重要的是熵产生的计算。

一个固定的单位体积元中熵(密度)随时间的变化应该等于该体积元中的"熵产生" P.与"外界"流入这个体积元的熵之和,即

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s + P_s \, \mathbf{o} \tag{4.11}$$

这里的熵产生与 Onsager 倒易关系是相互联系的。即:

$$P_{s} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{X} = X_{i} L_{ii} X_{i}$$

这里 L_{ij} 必须满足 Onsager 倒易关系 $L_{ij}=L_{ji}$ 。【见 H. B. G. Casimir, On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility, Rev. Mod. Rhys. 17 (1945), 343-350】

另一方面,我们从热力学关系局域形式 $Tds = d\varepsilon$ 出发,得到

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{T} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} .$$

(虽然系统整体是封闭的,但是每一个局域都是"开放"的,所以这里用偏微分表示。)计算内能密度随时间变化,有:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q + \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{E} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q + \eta J_e^2 \, . \tag{4.12}$$

方程右边第一项是热流的散度(热扩散),最后一项是电阻引起的电"加热"功率。于是有

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{T} \left(-\nabla \cdot \mathbf{J}_q + \eta J_e^2 \right) = -\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{J}_q}{T} \right) + \frac{1}{T} \left(\eta J_e^2 - \mathbf{J}_q \cdot \frac{\nabla T}{T} \right), \tag{4.13}$$

则熵流

$$\mathbf{J}_{s} = \mathbf{J}_{a} / T , \qquad (4.14)$$

熵产生率

$$P_{s} = \frac{1}{T} \left(\eta J_{e}^{2} - \mathbf{J}_{q} \cdot \frac{\nabla T}{T} \right) = -\frac{\mathbf{J}_{e}}{T} \cdot \nabla \phi - \frac{\mathbf{J}_{q}}{T} \cdot \nabla T$$

$$\equiv -\mathbf{J}_{s\phi} \cdot \nabla \phi - \mathbf{J}_{sT} \cdot \nabla T \quad . \tag{4.15}$$

【作业】4.1: 给定 Maxwellian 平衡分布 $f_0(\mathbf{v})$,利用 Plemji 公式,计算极化率张量。

【作业】4.2: 对于上面的两端保持确定的温度 T_1 和 T_2 、且系统处于定态的金属棒,利用在定态下只有静电场及 $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ 和稳恒电流 $\nabla \cdot \mathbf{J}_e = 0$ 的条件,可以得到:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q + \mathbf{J}_e \cdot \mathbf{E} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q - \mathbf{J}_e \cdot \nabla \phi = -\nabla \cdot (\mathbf{J}_q + \phi \mathbf{J}_e) \cdot \mathbf{J}_q$$

有

$$\frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{1}{T} \nabla \cdot (\mathbf{J}_q + \phi \mathbf{J}_e) = -\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{J}_q + \phi \mathbf{J}_e}{T} \right) - \frac{\mathbf{J}_q + \phi \mathbf{J}_e}{T^2} \nabla T \cdot \mathbf{0}$$

则似乎可以得到熵流 $\mathbf{J}_s = (\mathbf{J}_q + \phi \mathbf{J}_e)/T$,熵产生率

$$P_{s} = -\frac{\mathbf{J}_{q} + \phi \mathbf{J}_{e}}{T^{2}} \nabla T$$
 .

这个结果的问题在哪里?

5. 非平衡态等离子体物理过程

5.1 逆 "Landau 阻尼"

5.1.1 Landau 阻尼

"Landau 阻尼"是典型的非平衡态统计物理过程。

我们考虑等离子体中一个小的密度扰动。如果扰动的时间尺度很短,电子产生一个"线性响应",导致电子密度偏离原来的空间分布;而因为惯性较电子大得多,离子基本保持原来的分布。这样就导致一个扰动静电场。这个静电场"扰动"周围的电子,形成扰动静电场的空间传播——静电波。我们来看这个静电波对一个初始处于热力学平衡(Maxwellian 分布)的等离子体会有什么影响。

静电扰动下,无碰撞等离子体满足 Vlasov-Poisson 方程组,即 $\nu_c=0$ 的 (2.14-15)。其 Fourier 变换形式为:

$$-i\left(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}\right) \tilde{f}_{\omega \mathbf{k}\alpha} - i \frac{q_{\alpha} \Phi_{\omega \mathbf{k}}}{m_{\alpha}} \mathbf{k} \cdot \frac{\partial f_{0\alpha}}{\partial \mathbf{v}} = 0, \qquad (2.14a)$$

$$k^{2}\Phi_{\omega\mathbf{k}} = 4\pi \sum_{\alpha} q_{\alpha} \int d\mathbf{v} \tilde{f}_{\omega\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) . \tag{2.15a}$$

高频静电扰动下,可以假设离子不响应,则等离子体电子分量满足

$$-i\left(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}\right) \tilde{f}_{\omega \mathbf{k}} + i \frac{e\Phi_{\omega \mathbf{k}}}{m_e} \mathbf{k} \cdot \frac{\partial f_{0e}}{\partial \mathbf{v}} = 0, \qquad (5.01)$$

$$k^{2}\Phi_{\omega\mathbf{k}} = 4\pi e \int d\mathbf{v}\tilde{f}_{\omega\mathbf{k}}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \, . \tag{5.02}$$

可以得到

$$\tilde{f}_{\omega \mathbf{k}} = \frac{e\Phi_{\omega \mathbf{k}}}{m_{\alpha e}} \frac{k\partial f_{0e} / \partial u}{\omega - ku},$$
(5.03)

及色散关系

$$1 - \frac{\omega_{pe}^2}{k^2} \int du \frac{dF_{0e} / du}{u - \omega / k} = 0 .$$
 (5.04)

其中 $F_{0e}(u)$ 在第二章中已经定义。

对于高频静电扰动 $\omega \sim \omega_{pe} >> k \upsilon_e$ ($\upsilon_e \equiv \sqrt{T_e/m_e}$ 是电子的"热速度"),可以得到 Vlasov 解,即 Langmuir 波的色散关系

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + 3k^2 v_e^2 . {(5.05)}$$

但是 Landau 指出,这个解是不完全的。事实上(5.04)在 $u = \omega/k$ 处有一个奇点。这个奇点显然就是一波的相速度运动的粒子与波之间的"共振"。对于热平衡等离子体,这种波与粒子之间的相互作用会对波产生"阻尼"——即粒子从波获得能量而被"加速",从而引起粒子分布函数的改变——在粒子与波之间的"共振"点附近偏离原来的 Maxwellian 分布。

5.1.2 逆 Landau 阻尼

如果粒子初始就处于非平衡态,即其初始分布函数偏离 Maxwellian 分布,比如在某一速度区间出现"粒子数反转"——"高能级"的粒子多于"低能级"的粒子。则在这一"粒子数反转"区间就会产生逆 Landau 阻尼——激发相速度处于"粒子数反转"速度区间的静电波!我们在《高等等离子体物理》课程中会深入讨论这一问题。

5.1.3 束流不稳定性

如果有一束粒子流注入等离子体,则总的粒子分布成为本底"热粒子"满足的 Maxwellian 分布与粒子束速度附近的束流粒子分布的叠加。则在粒子束速度的"低速侧"会出现非常显著的"粒子数反转",从而激发其快速增长的静电扰动。我们把这种现象称为"束流不稳定性"。这是速度空间最重要的不稳定性,也是非常典型的非平衡态统计物理现象。

这种不稳定性可以用简单的"多流体"模型来描述。

假设在背景等离子体为静止的坐标系中,有一在空间呈均匀分布的电子束流,其速度为 u_0 ,密度为 n_{b0} 。则在关于(静止背景)等离子体电子、束流电子、与等离子体离子的"三流体"模型下,借助《高等等离子体物理》课程中的讨论,静电的等离子体波的色散关系为

$$1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2} - \frac{\omega_{be}^2}{(\omega - ku_0)^2} - \frac{\omega_{pi}^2}{\omega^2} = 0.$$
 (5.06)

其中

$$\omega_{pi}^2 = 4\pi (n_{e0} + n_{b0})e^2 / m_i$$
, $\omega_{pe}^2 = 4\pi n_{e0}e^2 / m_e$, $\omega_{be}^2 = 4\pi n_{b0}e^2 / m_e$.

在 $\omega \sim ku_0$ 的频段,这个色散关系近似地可以写成

$$\frac{\omega_{pe}^2}{\omega^2} \approx -\frac{\omega_{be}^2}{(\omega - ku_0)^2},$$

即

$$(\omega - ku_0)^2 \omega_{pe}^2 + \omega^2 \omega_{be}^2 = 0 . ag{5.07}$$

可以解出波的频率

$$\omega_{R} = \frac{ku_{0}}{1 + n_{b0} / n_{e0}}, \qquad (5.08)$$

及波的增长率

$$\frac{\gamma}{\omega_R} = \pm (n_{b0} / n_{e0})^{1/2} \, . \tag{5.09}$$

其中有一支是不稳定的解。

这个问题当然也可以用动理学方法研究。但是,从"多流体"模型的结果(5.08) 我们就可以知道,波的相速度

$$\frac{\omega_R}{k} = \frac{u_0}{1 + n_{b0} / n_{e0}} < u_0, \tag{5.10}$$

确实落在東流粒子的速度分布峰值 u_0 的"低速侧"。这是因为得到色散关系(**5.06**)的"多流体"模型做了"冷等离子体"的假设——相当于背景等离子体和电子束流在速度空间的分布都是 δ -函数的形式。

5.2 等离子体中的混沌现象

5.2.1 混沌——通向湍流的道路

混沌(Chaos)的研究在 80 年代曾经成为非平衡态统计物理研究的热点——试图用这一理论来解决物理规律的微观可逆性与宏观不可逆性之间的矛盾。当时流行的观点认为:宏观多粒子体系的强非线性导致微分方程解的失稳和分岔,使得在做"时间反演"时,任何一点小的扰动(即使是热起伏)都会使得微分方程的解在相空间出现与"来时"路径完全不同的分岔。

而这种失稳和分岔,最初是作为"通向湍流的道路"来研究的。

Landau 在 30 年代提出,因为解释湍流谱的困难,可以先研究湍流的频谱(即所谓"时间湍流"问题;在频域空间,通向湍流(严格地说是"时间湍流)的道路有三种: 1)周期——倍周期分岔——混沌, 2)周期——阵发混沌——混沌, 3)周期——准周期——混沌。

倍周期和阵发混沌的现象在很多物理、化学理论模型与实验中被发现。但是 准周期到混沌的道路很少看到报道。最典型的通过准周期到混沌的模型是对频率 或者相角进行所谓"调制",如:

$$\cos \omega t \rightarrow \cos(\omega + \alpha \sin \Omega t)t$$
, $\cos \omega t \rightarrow \cos(\omega t + \beta \sin \Omega t)$;

其中的 α, β 都是小量,而 ω/Ω 取做无理数。

但是,实际的物理过程也可以产生"内禀"的调制而实现"准周期到混沌"。 我们在 80 年代初曾提出过等离子体中的"磁"Lorenz 方程,在其解中得到了"准 周期到混沌"的现象,并给出了物理解释。后来中国科大的等离子体物理实验室 在实验中看到了"准周期到混沌"的现象。

5.2.2 Lorenz 方程组与"奇异吸引子"

Lorenz 方程组的"奇异吸引子"(strange attractor)解是混沌理论研究中最著名的工作【E. N. Lorenz, J. Atom. Sci. 20 (1963) 130】。

Lorenz 方程组是描述 Rayleigh-Bénard 对流问题(例如重力场中具有与重力同向温度梯度的流体层)的简单模型,写作:

$$\frac{dx_{1}}{dt} = \sigma(x_{2} - x_{1}),$$

$$\frac{dx_{2}}{dt} = x_{1}(\rho - x_{3}) - x_{2},$$

$$\frac{dx_{3}}{dt} = x_{1}x_{2} - \beta x_{3}.$$

其中 σ 是 Prandtl 数, ρ 是 Rayleigh 数, σ , β , ρ >0。对一般流体,取 σ =10, β =8/3,在 ρ =28 时,会出现所谓"奇异吸引子"的混沌现象(如图)。

5.2.3 等离子体中的混沌

在磁流体中,考虑磁场扰动 x_4 和磁剪切 \hat{s} ,我们可以得到下面的"磁流体"中的 Lorenz 方程组【Qiu & Wang, Chin. Phys. Lett. 3, (1986) 105-108】:

$$\frac{dx_1}{dt} = \sigma(x_2 - x_1) - (4\pi^2 \sigma r \hat{s} / b) x_4,$$

$$\frac{dx_2}{dt} = x_1(\rho - x_3) - x_2 + 4\alpha^2 p_m r \hat{s} x_4,$$

$$\frac{dx_3}{dt} = x_1 x_2 - \beta x_3,$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \hat{s} x_1 - p_m x_4.$$

其中 x_a 对"流体分量" x_1 和 x_2 的驱动可以引起准周期到混沌的变化。

中国科大等离子体物理实验室在等离子体实验中看到了"准周期到混沌" 【Ding WX et al, PRL 70, (1993) 170-173】,"阵发混沌"【如 Feng DL et al, PRE 54, (1996) 2839】等等走向混沌的现象。

5.2.4 混沌研究的进展

上面这些研究主要都是在"时间混沌——时间湍流"(对应频谱)方面的研究。而真正的空间混沌——空间湍流研究(对应波数空间湍流谱)则很少。

值得一提的河北大学和中科院物理所在介质阻挡放电研究中看到的放电斑图从空间周期(晶格)——准周期(准晶格)——空间混沌("非晶体")的变化过程【Dong LF et al, PRE 73, (2006) 066206】。这应该是进一步发展混沌理论研究的方向。

5.3 等离子体中的输运过程

5.3.1 等离子体中的经典输运

等离子体中的经典输运过程可以用双流体近似来描述。在稳态输运时,可以 忽略惯性项,有

$$n_{_{\!lpha}}q_{_{\!lpha}}iggl(\mathbf{E}+rac{\mathbf{u}_{_{lpha}} imes\mathbf{B}}{c}iggr)-n_{_{\!lpha}}
abla\,T_{_{\!lpha}}-T_{_{\!lpha}}
abla n_{_{\!lpha}}=n_{_{\!lpha}}
u_{_{lpha}}m_{_{\!lpha}}\mathbf{u}_{_{\!lpha}}+n_{_{\!lpha}}
u_{_{lphaeta}}m_{_{lphaeta}}(\mathbf{u}_{_{lpha}}-\mathbf{u}_{_{eta}})$$
 ,

这里 $\alpha=i,e$,右边第一项是自碰撞 (ν_{α}),第二项是互碰撞,且有 $\nu_{\alpha\beta}=\nu_{\beta\alpha}\equiv\bar{\nu}$, $m_{\alpha\beta}=m_{\alpha}m_{\beta}/(m_{\alpha}+m_{\beta})\approx m_{e}\, .$

考虑横越磁力线的扩散(可以忽略自碰撞)。如果磁场在z方向,引入 $\mathbf{u}=u_x+iu_y$,我们有

$$\begin{split} &(\overline{\nu}-i\Omega_{ce})\mathbf{u}_{e}-\overline{\nu}\mathbf{u}_{i}=\mathbf{A}_{e}\equiv-\frac{e}{m_{e}}\mathbf{E}-\frac{1}{m_{e}}\nabla T_{e}-v_{e}^{2}\frac{\nabla n_{e}}{n_{e}}\text{,}\\ &\left[\frac{\Omega_{ci}}{\Omega_{ce}}\overline{\nu}+i\Omega_{ci}\right]&\mathbf{u}_{i}-\frac{\Omega_{ci}}{\Omega_{ce}}\overline{\nu}\mathbf{u}_{e}=\mathbf{A}_{i}\equiv\frac{e}{m_{i}}\mathbf{E}-\frac{1}{m_{i}}\nabla T_{i}-v_{i}^{2}\frac{\nabla n_{i}}{n_{i}}\text{.} \end{split}$$

有

$$\Omega_0^2\mathbf{u}_{_i}=(\overline{\nu}-i\Omega_{_{ce}})\mathbf{A}_{_i}+\frac{\Omega_{_{ci}}}{\Omega_{_{ce}}}\overline{\nu}\mathbf{A}_{_e}$$
 ,

$$\Omega_0^2 \mathbf{u}_e = \left(rac{\Omega_{ci}}{\Omega_{ce}} \overline{
u} + i\Omega_{ci}
ight)\!\mathbf{A}_e + \overline{
u}\mathbf{A}_i$$
 ,

其中

$$\Omega_0^2 \equiv (\overline{
u} - i\Omega_{ce}) \Big(\overline{
u}\Omega_{ci} \ / \ \Omega_{ce} + i\Omega_{ci} \Big) - \overline{
u}^2\Omega_{ci} \ / \ \Omega_{ce}$$
 o

1) 强磁化弱碰撞 —— $\Omega_{ce}, \Omega_{ce} >> \overline{\nu}$

对于强磁化弱碰撞的托卡马克等离子体,近似有

$$\Omega_0^2pprox\Omega_{ci}\Omega_{ce}$$
 ${f u}_ipprox-i{f A}_i\left/\Omega_{ci}
ight.$ ${f u}_epprox i{f A}_e\left/\Omega_{ce}
ight.$

显然,如果不考虑电场,这些横越磁力线的运动都是漂移运动(垂直于引起漂移的梯度,即磁面变化的方向)。显然都是在磁面内的运动。而横越磁面的运动是碰撞或者磁面内垂直磁力线的静电扰动引起的。

2) 碰撞引起的跨越磁面(即梯度方向)的输运

不考虑电场的贡献,我们有跨越磁面的输运

$$\mathbf{u}_{i\perp} = -D_{ein\perp} rac{
abla n}{n} - D_{eiT\perp} rac{
abla T}{T}$$
 ,

$$\mathbf{u}_{e\perp} = -D_{ien\perp} rac{
abla n_i}{n_i} - D_{ieT\perp} rac{
abla T_i}{T_i}$$
 ,

这里

$$D_{_{ein\perp}}=D_{_{eiT\perp}}pproxrac{arphi_{_{e}}^{2}\overline{
u}}{\Omega_{_{ci}}\Omega_{_{ce}}}=rac{c_{_{s}}^{2}\overline{
u}}{\Omega_{_{ci}}^{2}}\equiv
ho_{_{s}}^{2}\overline{
u}$$
 ,

$$D_{\scriptscriptstyle ien\perp} = D_{\scriptscriptstyle ieT\perp} pprox rac{v_{\scriptscriptstyle i}^2 \overline{
u}}{\Omega_{\scriptscriptstyle ci}\Omega_{\scriptscriptstyle ce}} \equiv rac{T_{\scriptscriptstyle i}}{T_{\scriptscriptstyle e}}
ho_{\scriptscriptstyle s}^2 \overline{
u} \; .$$

可见,无论电子还是离子的扩散,都有 $D_\perp \sim 1/B^2$ 。这是典型的横越磁力线的经典扩散的标度。这是因为扩散系数 $D_\perp \sim \Delta^2 \sim \rho_c^2$,而影响横越磁力线扩散的特征尺度是粒子回旋半径。

5.2.2 等离子体中的新经典输运

这一部分的内容需要预先学习托卡马克等离子体物理的知识。

对托卡马克磁场 $\mathbf{B} = \mathbf{B}_{\zeta} - \mathbf{e}_{\zeta} \times \nabla \psi / R$, 在细环(大环径比)近似下,有

$$B = \left(B_{\zeta}^{2} + \frac{(\nabla \psi)^{2}}{R^{2}}\right)^{1/2} \approx B_{\zeta} \approx \frac{B_{0}}{1 + \frac{r}{R}\cos\theta} \circ$$

我们知道,非均匀磁场会形成对粒子"捕获"的所谓"磁镜"效应。对单个粒子来说,托卡马克磁场的"捕获"条件为

$$\frac{\mu B_0}{\varepsilon} \le 1 + \frac{r}{R} \cos \theta \circ$$

1)"捕获"粒子与"香蕉轨道"

对于不同的磁面 $r \approx r_0$,可是得到相应的"反转点" $\theta_{tr} \approx \pm \cos^{-1} \left(\frac{R}{r_0} \left(\frac{\mu B_0}{\varepsilon} - 1 \right) \right)$ 。

在小环截面 ζ =常数上,"捕获"粒子轨道呈一个香蕉形状,被称为"香蕉轨道"。 所以又称"捕获"粒子为"香蕉粒子"。考虑 $\cos\theta$ 的最大变化范围,我们有所有 "捕获"粒子满足的条件

$$\frac{\mu B_0}{\varepsilon} \le 1 + \frac{r}{R} \circ$$

考虑所用粒子主要被"捕获"在环形装置的外侧,即"捕获"粒子都经过 $\theta=0$ 的点,而在装置最内侧发现"捕获"粒子的几率是零。所以近似有"捕获"粒子的角分布

$$n_{tr}(r,\theta) = n_{tr}(r,0)\cos\frac{\theta}{2}$$
 o

近似的估算得到磁面 $r = r_0$ 上的损失锥的临界角

$$\sin^2 lpha_c = rac{B_{\min}}{B_{\max}} pprox rac{1-arepsilon_0}{1+arepsilon_0} pprox 1-2arepsilon_0$$
 , $\cos lpha_c pprox \sqrt{2arepsilon_0}$,

这里 $\varepsilon_0 \equiv r_0/R$ 是环径比。相应的有 $n_{tr}/n \approx \sqrt{2\varepsilon_0}$ 。当然这些都是在细环近似下得到的。而对 ITER 这样的先进托卡马克来说,细环近似并不适用。所以实际的捕获粒子的比例要高得多。

对飞行粒子(passing particles,或 traveling particles)来说,绕环一周的时间大约是 $\tau_{un}\sim 1/\kappa \upsilon_{\alpha}\approx qR/\upsilon_{\alpha}$ ($\alpha=i,e$)。而对捕获粒子,完成一个香蕉轨道的时间大约是

$$au_{\scriptscriptstyle tr} pprox q R \, / \, \overline{\mathcal{U}}_{\!lpha \parallel} \sim au_{\scriptscriptstyle un} \, / \, \sqrt{arepsilon_0}$$
 ,

对应的香蕉轨道区的半宽度为

$$\Delta r_{\!\scriptscriptstyle b} pprox q
ho_{\scriptscriptstyle clpha} / \sqrt{arepsilon_{\scriptscriptstyle 0}}$$
 , $ho_{\scriptscriptstyle clpha} \equiv arphi_{\scriptscriptstyle clpha} / \Omega_{\scriptscriptstyle clpha}$.

显然的,对于捕获粒子(香蕉粒子)来说,横越磁力线的扩散不再是回旋半径决定的,而是香蕉轨道的宽度决定的。另外,考虑到捕获粒子的比例及对应速度空间的分布,实际碰撞频率 $\nu'\sim\nu\varepsilon_0^{-1/2}$ 。粗略的估计, 有

$$D_{\perp}^{neo} \sim v'(\Delta r_h)^2 \sim q^2 v \rho_c^2 \varepsilon_0^{-3/2} \sim q^2 D_{\perp}^{cl} \varepsilon_0^{-3/2} >> D_{\perp}^{cl}$$

由此得到的香蕉粒子的有效碰撞频率 $v_{\it e\!f\!f}\sim vq^2\,/\,{\it \mathcal{E}}_0$ 。

2) 香蕉区、平台区、碰撞区

比较香蕉轨道周期与碰撞频率,可以由三种情况:

香蕉区:
$$v_{eff}\tau_b \sim vq^3\varepsilon_0^{-3/2}R/\upsilon_\alpha << 1$$

对应的横越磁力线的扩散系数

$$D_{\perp}^{neo}\approx 0.66q^2\varepsilon_0^{-3/2}D_{\perp}^{cl}$$

其中 D^d 是 5.2.1 中给出的经典的横越磁力线扩散系数;

平台区:
$$v_{eff}\tau_b \sim 1$$

对应的横越磁力线的扩散系数

$$D_{\perp}^{neo} \approx 1.9 q v_{\alpha} \rho_{c\alpha}^2 / R$$
;

碰撞区:
$$v_{eff}\tau_b >> 1$$

对应的横越磁力线的扩散系数

$$D_{\perp}^{neo} pprox (1+1.6q^2) D_{\perp}^{cl}$$
 .

5.2.3 等离子体中的反常输运

但是,托卡马克等离子体中实际观测到的扩散是所谓 Bohm 扩散,即

$$D_{\perp} \sim 1/B$$
 .

这大大影响了磁约束的效率。这种扩散被称为"反常扩散"。一个粗略的模型是: 横越磁力线扩散的特征尺度在一个方向上仍然是小尺度,但是在另一个方向上 产生了与磁场强度无关的长程关联。

即使是新经典扩散还是远比反常扩散慢得多。但是新经典扩散被认为是托卡马克等离子体可能达到的最佳能量约束。层状流(zonal flow)的发生可以抑制反常扩散,使实际的扩散降低到接近新经典扩散的水平。有关的理论与实验我们会在《等离子体湍流与输运》的专题中讨论。

【作业】5.1: 试计算 Landau 阻尼条件下系统熵的变化,并解释其物理意义。

【作业】5.2: 假设 5.1.3 中讨论的束流与本底等离子体都是 Maxwellian 的,试用 Landau 阻尼理论讨论不稳定性的增长率并与(5.09)式比较。