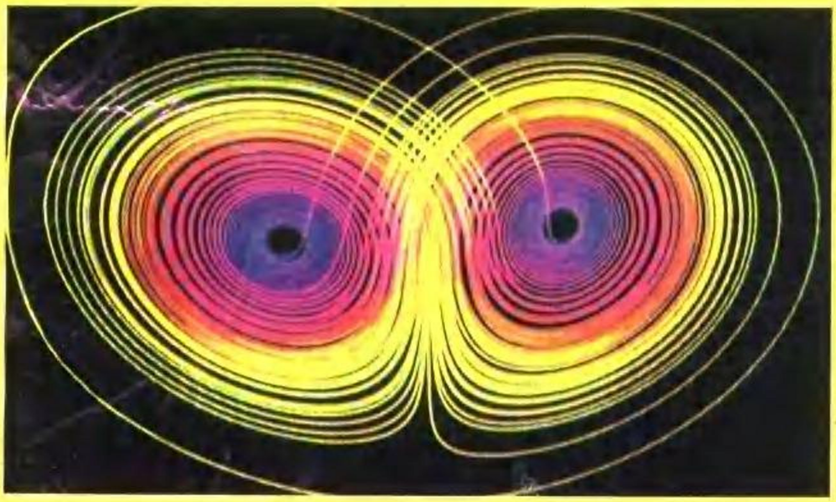
非平衡统计物理研究进展

第八届非平衡统计物理学术讨论会论文集

全国非平衡统计物理学术研究委员会　审定

主编　罗久里



四川大学出版社

非平衡统计物理研究进展

第八届非平衡统计物理学术讨论会论文集

全国非平衡统计物理学术研究委员会　审定

主　编　罗久里

四川大学出版社

1993年·成都

(川)新登字 014 号

责任编辑：项其祥
封面设计：冯先洁
技术设计：项其祥

非平衡统计物理研究进展

第八届全国非平衡统计物理

学术讨论会论文集

罗久里　主编

四川大学出版社出版发行　（成都市望江路 29 号）
四川省新华书店经销　郫县犀浦印刷厂印刷
850×1168mm　32 开本　8.75 印张　2 插页　211 千字
1993 年 6 月第 1 版　1993 年 6 月第 1 次印刷
印数：001—500 册
ISBN 7—5614—0817—X/O・82　定价：8.50 元

前　　言

这个文集收入的论文(摘要),主要选(摘)自1992年5月4—9日在成都召开的“第八届全国非平衡统计物理学术讨论会”的特邀报告及小组报告,展示了我国学者近两年来在非平衡统计物理各个领域所取得的成果。这些论文的研究内容涉及非平衡统计物理及非线性物理的许多领域,如随机、混沌、分形、湍流、自组织、非平衡涨落、非平衡统计算符、非平衡相变与临界现象、不稳定性、输运和熵等基本范畴,以及它们在凝聚态物理、光学、流体、力学、原子分子物理、受控热核反应、化学、生物学、地震学、气象学、环境科学、人口理论和社会学等学科中的应用,既有基础理论研究又有应用研究;既有目前面临的重要基本问题,又涉及到许多新学科中的若干前沿课题,从一个侧面反映了我国从事非平衡统计物理研究学者的研究动态和取得的进展。如果这个集子对读者有所俾益,正是编者最大的愿望。

本文集经“全国非平衡统计物理学术研究委员会”审定,由罗久里、宋永桀负责编辑,参加文稿整理工作的还有涂鹃、李琳丽等同志。该书在编辑出版过程中曾得到国内很多从事非平衡统计物理研究的专家、学者的关怀和帮助,谨在此致以衷心的谢意。

编　者

1992年10月15日

目 录

非平衡统计物理发展中的几个问题

欧阳容百

（南京大学物理系）

系统的靠近平衡的非平衡态自发的演化趋势是趋于平衡，故其性质与平衡态的相似，近平衡态统计物理已发展成熟。关于远离平衡问题的研究，六十年代以来广泛开展，主要内容有非平衡统计物理的基本理论、宏观系统的非平衡过程的基本规律、非平衡涨落、非平衡相变和临界现象，以及在外场驱动下，耗散系统的非线性动力学问题和非线性弛豫过程等。近十多年来，突变、有序与结构、混沌、孤子及分形等非线性问题的研究取得重大的进展，两者交织在一起，相互渗透和促进，远远超出了物理学的范围，广泛应用于诸多学科领域。非平衡统计物理是研究处于非平衡特别是远离平衡态的宏观系统的演化过程，因而极其复杂，且产生各种变异，因此它还不够成熟，不够系统，但它突破了传统的物理学理论和方法的框架，并通过与其它学科交叉、结合，向比较成熟的、更为普遍的非平衡统计理论的方向发展，它是一门具有很强生命力的新兴学科，是当代科学的前沿。

一、描述非平衡系统的几种理论和方法

提出的理论和方法很多，只介绍几种。

1. 广义输运方程和非线性 Langevin 方程[4][5][2][3][10]

1977 年，Grabert 推广和改进了 Mori 和 Zwanjig 理论。

宏观上描述一个宏观系统只需少数的宏观变量，它们或者是遵守守恒定律，或者是与连续对称性破缺有关的序参量，均属慢变

量。设有一套宏观变量 $A=(A_1, A_2, \cdots, A_j)$，可以找到一相关密度矩阵 $\tilde{\rho}(t)$，它完全由平均值 $\langle A_j(t)\rangle$ 决定，并有

$$tr\,(A_j\tilde{\rho}(t)) = tr(A_j\rho(t)) = \langle A_j(t)\rangle, tr\tilde{\rho}(t) = 1 \tag{1}$$

对 $\tilde{\rho}(t)$ 的初始条件作如下假设

$$\tilde{\rho}(O) = \rho(O) \tag{2}$$

Grabert 定义一与时间有关的投影算符 $P_A(t)$：

$$P_A(t)G = tr\{\tilde{\rho}(t)G\} + \sum_j (A_j - \langle A_j(t)\rangle)tr\left\{\frac{\partial\tilde{\rho}(t)}{\partial\langle A_j(t)\rangle}G\right\} \tag{3}$$

G 为任意算符。P_A 无厄米性，但可定义其转置算符

$$tr\{\rho(t)P_A(t)G\} \equiv tr\{GP_A^T(t)\rho(t)\} \tag{4}$$

根据(3)式可得

$$P_A^T(t)\rho(t) = \tilde{\rho}(t) \tag{5}$$

即相关密度矩阵是 $P_A(t)$ 的转置算符对密度矩阵作用的结果。利用 $\tilde{\rho}(t)$ 构成的投影算符，不难得到

$$\langle \dot{A}_j(t)\rangle = u_j(t) + \int_{t'}^{t} d\xi K_j(t,\xi) + \langle F_j(t,t')\rangle \tag{6}$$

其中

$$K_j(t,t') = e^{iLt'}Q(t')J(t',t)\dot{A}_j \tag{7}$$

$$\begin{aligned}\langle F_j(t,t')\rangle &= tr\{\delta\rho(t')J(t',t)\dot{A}_j\}, \delta\rho(t') = \rho(t') - \tilde{\rho}(t') \\ &= [1 - P_A^T(t')]\rho(t')\end{aligned} \tag{8}$$

式中 J 为时序指数

$$J(t',t) = \tilde{T}\exp\{\int_{t'}^{t} d\xi iLQ(\xi)\} \tag{9}$$

$\tilde{T}$ 是反时序算子。(6) 式右端第一项为 $\dot{A}_j$ 对相关密度矩阵取平均值的结果；第二与第三项之和为非相关部分的贡献，前者

$\int_{t'}^{t} d\xi K_j(t,\xi)$ 是系统在(t',t)间隔内经过平均轨道$\{\langle A(\xi)\rangle, t'\leqslant\xi\leqslant t\}$给出的贡献，后者$\langle F_j(t,t')\rangle$是在$t'$时刻$\delta\rho(t')$的贡献。可令$t'=0$，由于(2)，根据(8)，$\langle F_j(t,0)\rangle = 0$，于是(6)变为不述宏观量平均值的封闭方程

$$\langle \dot{A}_j(t) \rangle = tr\{\tilde{\rho}(t)\dot{A}_j\} + \int_0^t d\xi tr\{\tilde{\rho}(\xi)iLQ(\xi)J(\xi,t)\dot{A}_j\}$$
$$= u_j[\langle A(t)\rangle] + \eta_j\{\langle A(\xi)\rangle, 0\leqslant\xi\leqslant t\} \tag{10}$$

(10)称为广义输运方程，其中u_j是组织漂移，η_j是无组织漂移。可以证明，(10)式还可写成

$$\langle \dot{A}_j(t)\rangle = -\sum_K \mu_{jk}(t)f_k(t) - \int_0^t d\xi \sum_k L_{jk}(t,\xi)f_k(\xi) \tag{11}$$

式中f为驱动力，L为广义输运系数。

在准确的、涨落$\delta A_j(t)$所遵从的Langevin方程

$$\delta\dot{A}_j(t) = \sum_k (\hat{\Omega})_{jk}\delta A_k(t) + \int_0^t d\xi \sum_k K_{jk}(t,\xi)\delta A_K(\xi) + F_j(t) \tag{12}$$

中涨落力慢变部分可通过推迟效应时$\delta\dot{A}$产生影响。由于在相变或分叉的临界点附近，会出现大幅度的慢度涨落，则(12)就不适用了。可采用扩大宏观变量的集合的方法，使其包括A的所有非线性函数，从而求得随机变量$\alpha(t)$的非线性方程

$$\dot{\alpha}_j(t) = J_j(\alpha(t)) + \sum_K g_{jk}(\alpha(t))\zeta_k(t) \tag{13}$$

(13)与A的几率分布函数的广义Fokker－Planck方程等价，其中$g_{jk}(\alpha)$满足

$$\sum_l g_{jl}(\alpha) = J_{jk}(\alpha) \tag{14}$$

式中$J_j(\alpha)$，$J_{jk}(\alpha)$分别为漂移矢量和扩散矩阵，而$\zeta_j(t)$是Gauss

型的 δ 相关涨落量

$$\langle\zeta_j(t)\rangle = 0,\ <\zeta_j(t)\zeta_k(t') = \delta_{jk}\delta(t-t') \tag{15}$$

2. 推广的 Glibbs 统计系综方法 Zubarev 理论[1][9]

这类方法用于研究非平衡体系在热微扰下的性质。可分为两个不同的学派：以构成局域运动积分为基点的非平衡统计算符方法和以根据非保守力来考虑热源影响为基点的 Mac Lennan 方法。前者更为普遍，应用相当广泛，也较方便。Zubarev 等学者运用和发展了这种方法，它可用于流体力学，核自旋扩散理论，核磁弛豫理论及半导体中的热电子理论等，此方法不仅对线性耗散过程而且对电场强非线性的情形也都是有效的。运用这种方法还可导出更普遍的动力学方程及建立 Fokker－Planck 型方程。Zubarev 根据 Bogoliubov 关于非平衡统计力学中的弛豫时间具有动力学、流体力学阶段等若干个不同阶段的观点，把基于能量和粒子数守恒定律，构成平衡统计算符的 Gibbs 方法推广到非平衡态，建立非平衡统计算符。它是在比动理学阶段的弛豫时间大得多的时间范围内研究非平衡系统的一种方法。

Zubarev 从下述形式的局域量守恒定律出发：

$$\frac{\partial P_m(\vec{x},\mathrm{t})}{\partial t} + \nabla\cdot \boldsymbol{J}_m(\vec{x},\mathrm{t}) = 0(\mathrm{m}=0,1,\cdots,\mathrm{l},\mathrm{l}+1) \tag{16}$$

式中 $P_m(\boldsymbol{x})$ 分别为 $\mathrm{H}(\boldsymbol{x})$、$\mathrm{n_j}(\boldsymbol{x})(\mathrm{j}=1,\cdots,\mathrm{l})$ 和 $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x})$，即能量、粒子数和动量的密度算符，$J\mathrm{m}(\boldsymbol{x})$ 分别为 $\vec{\boldsymbol{J}}_H(\vec{\boldsymbol{x}})$、$\boldsymbol{J}_{\mathrm{j}}(\boldsymbol{x})$

$(\mathrm{j}=1,\cdots,\mathrm{l})$ 和 $\mathrm{T}(\boldsymbol{x})$，即相应量的流密度，$\mathrm{T}(\boldsymbol{x})$ 又称应力张量。设在微小时间间隔 τ_1 内就可形成非平衡分布，此分布具有特征时间 $\tau \gg \tau_1$。对于 $\mathrm{t} \gg \tau_1$，设 $\mathrm{B_m}(\boldsymbol{x},\mathrm{t})$ 满足

$$\frac{\partial B_m(\boldsymbol{x},\mathrm{t})}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathrm{B_m}(\boldsymbol{x},\mathrm{t}),\mathrm{gl}] = 0 \tag{17}$$

则由 $B_m(\boldsymbol{x},\mathrm{t})$ 构成的泛函 $\rho(\mathrm{t}) = \rho\{\cdots\mathrm{B_m}(\boldsymbol{x},\mathrm{t})\cdots\}$ 应满足 Liouville 方程。我们所讨论的是含有 l 种组元、处于流体力学阶段的量

子体系。参量统一记为 $\{F_m(\boldsymbol{x},t)\}(m=0,1,\cdots,l+1)$，其中

$$F_0(\boldsymbol{x},t)=\beta(\boldsymbol{x},t),F_1(\vec{x},t)-\beta(\boldsymbol{x},t)v(\boldsymbol{x},t),F_{j+1}(\boldsymbol{x},t)=-\beta(\boldsymbol{x},t)$$

$$=-\beta(\boldsymbol{x},t)[\mu_j(\boldsymbol{x},t)-\frac{m_j}{2}v^2(\boldsymbol{x},t)](j=1,\cdots,l) \tag{18}$$

其中 $\beta(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{KT(\boldsymbol{x},t)}$，$\mu_j(\boldsymbol{x},t)$ 为各组元的化学势，$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{x},t)$ 为流体质心速度，m_j 是各组元的摩尔质量。和这些参量共轭的力学量统一用 $\{P_m(\vec{x})\}(m=0,1,\cdots,l+1)$ 表示，其中

$$P_0(\boldsymbol{x})=H(\boldsymbol{x}),P_1\boldsymbol{x}=\vec{\boldsymbol{P}}(\vec{x}),P_{j+1}(\boldsymbol{x})(j=1,\cdots,l) \tag{19}$$

注意 F_m 是依赖时间 t 的参量，而 P_m 是不显含 t 的量子学算符，在 Heisenberg 绘景中如有如下关系

$$P_m(\boldsymbol{x},t)=\exp(\frac{iglt}{h})P_m(\boldsymbol{x})\exp(\frac{-iglt}{h}) \tag{20}$$

为由 $\{F_m\}$ 构成满足(17)的守恒量 $\{B_m\}$，Zubarev 选取

$$B_m(\boldsymbol{x},t)=\varepsilon\int_{-\infty}^{0}e^{\varepsilon t_1}F_m(\boldsymbol{x},t+t_1)P_m(\boldsymbol{x},t_1)dt_1(\varepsilon\to 0) \tag{21}$$

容易证明(21)满足(17)式，且当 $\varepsilon\to 0$ 时，有

$$\frac{dB_m(\boldsymbol{x},t)}{dt}=0 \tag{22}$$

于是找到了运动积分 $B_m(\boldsymbol{x},t)$，即可构成非平衡统计算符

$$\rho(t)=\mathscr{D}^{-1}\exp\{-\sum_m\int d\boldsymbol{x}B_m(\boldsymbol{x},t)\} \tag{23}$$

经运算，不难得到所要寻求的非平衡统计算符

$$\rho(t)=D^{-1}\exp\{-\sum_m\lim_{\varepsilon\to 0}\int d\boldsymbol{x}\{F_{(}\boldsymbol{x},t)P_m(\boldsymbol{x})-\int_{-\infty}^{0}e^{\varepsilon t_1}$$

$$[F_m(\boldsymbol{x},t+t_1)\dot{P}_m(\boldsymbol{x},t)+\frac{\partial F_m(\boldsymbol{x},t+t_1)}{\partial t_1}P_m(\boldsymbol{x},t_1)]dt_1\} \tag{24}$$

对于定常态，由于$\frac{\partial \mathscr{F}_m}{\partial t_1}=0$，于是(24)代为

$$\rho = \mathscr{D}^{-1}\exp\left\{\begin{array}{l} -\sum_m \lim_{\varepsilon\to 0}\int dx\{F_m(x)P_m x \\ -\int_{-\infty}^{0} e^{\varepsilon t_1} F_m(x)\dot{P}m(x,t_1)dt_1\} \end{array}\right\} \tag{25}$$

当(24)指数中第二项不存在时，它就变为局域平衡分布，但可证明，这种分布所描述的状态不会产生耗散的输运过程，因而不能描述真正的非平衡过程。可将上面的讨论推广到动理学阶段，例如，对于一个空间均匀、粒子间有弱相互作用并处于动理学阶段的远离平衡的系统，参理场$\{F_m(x,t)\}$的描述方法便不再适用，但只要适当选择态参量，仍可应用非平衡统计算符方法，并可导出有关的动力学方程。

3. 利用作为 Liouville 方程的初始条件的局域分布的方法 Robertson 理论[10][4][5][1]

虽然当体系处于非平衡的初始时刻，形式上接近平衡的 Gibbs 分布，但必须引入这样的假定：具有与空间位置有关的参量的分布在各个小体元中均成立，并求出对此分布的修正。这种方法主要由 Mori 建立起来，Peletm inski 和 Yatsenko，Robertson 等人进一步发展。可以运用这种方法描述离开平衡任意远的系统，而且比不可逆过程的线性理论中所采用的微扰近似方法提供更一般的结果。Robertson 定义一广义正则统计算符

$$\sigma(t) = \exp[-\lambda_0(t) - \sum\int d^3r\lambda_n(r,\lambda)F_n(r)],\mathrm{tr}[\sigma(t)] = 1 \tag{26}$$

式中 $F_n(x)$ 是力学量，$\lambda_n(r,t)$ 是热力学坐标$\langle F_n(r)\rangle_t$ 的函数。Gibbs 正则和巨正则密度算符是 $\sigma(t)$的特殊情形。选择系统的初始条件是热力学平衡态之一。$\rho(t)$初始条件是

$$\rho(o) = \sigma(o) \tag{27}$$

Robertson 从 Liouville 方程出发，将由下式定义的线性算符

$$P(t)A=\sum_n\int d^3r\,\frac{\delta\sigma(t)}{\delta\langle F_n(\boldsymbol{r})\rangle_t}\mathrm{tr}[\mathrm{F_n}(\boldsymbol{r})\mathrm{A}] \tag{28}$$

作用在 $\dot{\rho}(t)$ 上，结果为 $\dot{\sigma}(t)$，经运算得出 Robertson 方程

$$\dot{\rho}(t)=-iP(t)L(t)\sigma(t)-\int_0^t dt'P(t)L(t)T(t,t')\\ [1-P(t')]L(t')\sigma(t') \tag{29}$$

从而求得一组 m 个关于 m 上 $\langle F_n(\boldsymbol{r})\rangle_t$ 耦合的非线性积分微分方程

$$\frac{\partial<F_n(\boldsymbol{r})>_t}{\partial t}=-\mathrm{itr}[\mathrm{F_n}(\boldsymbol{r})\mathrm{L(t)}\sigma(\mathrm{t})]-\int_0^t\mathrm{dt'tr}\\ \{\mathrm{F_n}(\boldsymbol{r})\mathrm{L(t)T(t,t')}[1-\mathrm{P(t')}]\mathrm{L(t')}\sigma(\mathrm{t'})\}(\mathrm{n}=1,\cdots,\mathrm{m}) \tag{30}$$

这个理论是保留记忆和局域的。利用关系式

$$L(t)A=-h^{-1}\int_0^1 dxd[A^xH(t)A^{1-x}]/dx \tag{31}$$

又可将(30)式改写为

$$\frac{\partial\langle \boldsymbol{F}_n\boldsymbol{r}\rangle_t}{\partial t}=\mathrm{tr}\{[\mathrm{il(t)Fx_n}(\boldsymbol{r})]\sigma(\mathrm{t})\}+\int_0^t\mathrm{dt'}\sum_{\mathrm{n'}}\\ \int\mathrm{d^3rK_{nn'}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\mathrm{t},\mathrm{t'})\lambda_{\mathrm{n}},(\boldsymbol{r};\mathrm{t'})(\mathrm{n}=1,\cdots,\mathrm{m}) \tag{32}$$

$$K_{nn'}(\boldsymbol{r},\vec{\boldsymbol{r}}',;t,t')=-\int_0^1\boldsymbol{dxtr}\{[\boldsymbol{il(t)F_n(r)}]\mathrm{T(t,t')}\\ [1-\mathrm{P(t')}]\sigma(\mathrm{t'})^x[\mathrm{il(t')F_n}(\boldsymbol{r}')]\sigma(\mathrm{t'})^{1-x}\} \tag{33}$$

这些方程是精确的。可以证有 $K_{nn'}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';\mathrm{t},\mathrm{t'})$ 是实量，并在线性近似中，满足倒易关系和时间反转对易关系。(32) 右端第一项为动力学项，积分项产生弛豫。以 $J\mathrm{n}(\boldsymbol{r},\mathrm{t})$ 表示与 $\mathrm{F_n}(\vec{\boldsymbol{r}})$ 对应的流算符，定义两种平均值

$$\langle A\rangle_t\equiv tr[A\sigma(t)],\overline{A}\equiv\int_0^1\sigma(t)^xA\sigma(t)^{1-x}dx-<A>_t \tag{34}$$

其中 A 是任意算符。不难得到

$$\frac{\partial < F_n(r) >_t}{\partial t} = - \nabla \cdot \langle J_n(r,t) >_t - \nabla \cdot$$

$$\int_0^t dt' \sum_{n'} \int d^3r K_{nn'}(r,t;r',t') \cdot \nabla' \lambda_{n'}(r;t')(n = 1,\cdots,m) \quad (35)$$

$$K_{nn'}(r,t;r',t') = < \bar{J}_n(r,t) T(t,t')$$
$$[1 - P(t')] J_{n'}(\vec{r}',t') >_{t'} \quad (36)$$

(29)、(30)(33)和(36)式中的线性算符 T(t,t')满足微分方程

$$\frac{\partial T(t,t')}{\partial t'} = iT(t,t')[1 - P(t')], T(t,t) = 1 \quad (37)$$

实际上,(30)、(32)和(35)是流体力学方程、London 方程及核磁的 Bloch 方程等的推广。Robertson 理论主要应用于外场特别是强外场驱动下,耗散系统的非线性动力学问题、非线性弛豫过程。

4. 非平衡统计密度算符(NESDO)的形式理论[7][4][5][1]

我们的工作不象普遍采用的方法那样,从 Liouville 方程出发,而是基于描述非保守系统的运动方程。非保守体系相空间几率密度 ρ 的运动方程为

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial\rho}{\partial\rho_i} F_i + \{\rho, gl\} \quad (38)$$

式中 ρ_i 是广义动量,F_i 是广义力。(38)的另一形式为

$$\frac{d\rho}{dt} = - \rho \sum_i \frac{\partial F_i}{\partial p_i} \quad (39)$$

(38)、(39)不同于可逆的 Liouville 方程,(39)的形式解为

$$\rho = C\exp[- \sum_i \int_{t_0}^t \frac{\partial F_i}{\partial p_i} dt] \quad (40)$$

其中 C 由初始条件确定,$\frac{\partial F_i}{\partial p_i}$ 具有熵流的意义。假设(i) 在量子情形下,体系的非平衡性质可由称之为体系的非平衡统计算符 $\rho(t)$