

Ab initio framework of hydrodynamics

Yunfan Huang

April 16, 2018

1 Microscopic Theory: ensemble theory [1]

这里所指的微观,是在基于微观原理建立的统计理论的意义而言的。

经典统计理论 基于 Hamilton 量的经典力学表达 $\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V} + \mathcal{H}'$, 应用统计系综概念及系统个数守恒可以推出经典 Liouville 方程, 或与之等价的 Poisson 括号形式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\Gamma, t) = \{H, \rho\}.$$

为了得到宏观量与系统应用微观状态的关系, 应用 Gibbs 假定“与微观物理量对应的宏观量是微观物理量的系综平均值”即可。注意, 上述方法对于平衡态和非平衡态均适用, 而平衡态统计力学的大部分问题实际上已经通过巨正则系综的方法解决了。经典理论的主要特点在于物质可以同时拥有确定的位置和动量, 粒子性 (*atomic property*) 也是其在一般情况下的特征。

量子统计理论 基于 Hamilton 量的量子力学表达 $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{V}} + \hat{\mathcal{H}}'$, 利用各子系统的 Schrödinger 方程, 可得到量子 Liouville 方程

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}].$$

其中密度算子 $\hat{\rho}(t)$ 定义为

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K |\Psi^{(k)}\rangle \langle \Psi^{(k)}|,$$

这里在求取宏观力学量的平均值时可采用薛定谔图景或海森堡图景。量子理论的关键在于海森堡不确定性原理, 即一对非对易可观测量一般来说不能同时具有确定的位置和动量。

2 Mesoscopic Theory: kinetic/dynamic theory

这里所指的介观, 是在多粒子系统的意义上而言的, 即系统所含粒子数多到无法直接应用微观动力学方程进行求解, 属于广义的介观概念。另外还有所谓狭义的介观概念则是指这类广义介观意义上的系统, 经典宏观性质对于它们来说不再成立, 而量子效应却十分显著。

动力学唯象方法 通过对相空间体积元内粒子数变化的分析, 可以直接形式地写出与宏观流体力学的积分型控制方程类似的方程。可以毫不夸张地说, **唯象模型的建立是动力学理论的亮点所在**。这种方法的优点是物理意义较为清晰, 而缺点同样在于此。为了给出所谓碰撞项 ($C(f)$, 或记为 $(\partial f / \partial t)_{\text{col}}$) 的具体形式, 需要人为地引入模型来封闭方程 (如同宏观方程需要引入本构关系那样), 如单/双弛豫时间近似模型 (*Single/Double Relaxation Time Approximation, SRTA/DRTA*)、二体短程势近独立碰撞模型 (*Two-body Collision Approximation with Short-range Potential and Independent Distribution, SI-2CA*) 等, 模

型参数一般需要依赖微观统计模型或实验结果来确定。特别地, 对于低温高密度等离子体, 分子间势可简化为德拜半径 λ_D 内的库仑屏蔽势, 且满足 $\lambda_D \ll \bar{r}$, 因此可应用 Boltzmann 方程进行描述, 此时 Boltzmann 碰撞项可以简化为基于小角度散射占优条件的 Fokker-Planck 碰撞项 [1]。

微观动力学方法 指基于上一节的微观统计模型, 并引入适当简化假设从而得到动理学方程的方法。

- 经典理论 [1–4, 8]。一种经典的模型是 *SI-2CA* 模型, 即基于二体相互作用假设 ($\mathcal{V} = \mathcal{V}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$), 可由 Liouville 方程导出 BBGKY 级列方程; 再利用稀薄气体假设 ($d \ll \bar{r}$, d 为粒子相互作用力程, $\bar{r}$ 为粒子平均间距)、统计独立性假设 ($\rho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t) = \rho_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)\rho_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)$) 将 BBGKY 级列方程链截断, 从而获得 Boltzmann 动理学方程。
- 量子理论 [5–7]。从目前掌握的专著来看, 大部分仍然是结合唯象方法进行的模型构建。由于基于模型在电子输运的情形下已经不再适用, 因此基于量子理论模型的分析与简化对于电子水动力学研究至关重要, 目前正在抓紧研读相关专著中。

3 Macroscopic Theory: hydrodynamics

这里所指的宏观, 是在系统的空间尺度的意义上而言的, 一般是指大块物质所具有的经典性质 (*classical bulk property*)。

经典宏观方程的特点与局限性 利用 BTE 的经典动理学唯象模型进行宏观水动力学方程推导时, 比较关键的条件有两点, 其一是对系统状态的要求, 即所谓局部近热平衡假设 [2, 8], 或写为 $f \doteq f_0$ (其中 f_0 是局部的 Maxwell-Boltzmann 分布函数), 这是在 *SI-2CA* 模型下利用 Chapman-Enskog 展开推导系统的本构方程时所必需的, 这同时也是 (无论狭义的还是广义的) *RTA* 模型的根本要求; 其二是对碰撞项的要求, 即要求其保证粒子数、动量及能量的守恒性 [3, 9], 这样在推导宏观方程时碰撞项自动消去, 这是 *SI-2CA* 模型以及狭义的 (即具有守恒特性的) *RTA* 模型能够保证的。在低阶近似下, 第一个条件蕴含第二个条件; 特别地, $f = f_0$ 时, 后者自然成立。上述两点假设是我们下面讨论**经典宏观方程的局限性**的基础。另外值得指出的是, 当直接从宏观角度推导积分型控制方程时, 需要做面力/体力简化以及 Cauchy 应力假设, 事实上这与上述条件是相类似的。

- 尺度效应。当边界散射占主导 (即 $L \lesssim \bar{r}$) 时, 尽管仍然可以形式地定义 f , 但这时微观粒子的平均自由程大于系统的宏观特征尺度, *RTA* 模型所基于的局部近热平衡假设不再成立, 系统处于远离平衡态的非平衡状态; 同时由于分子间散射此时不再占据主导地位, 基于二体碰撞假设的 *SI-2CA* 模型同样将会失效。这种输运现象一般成为弹道输运, 此时无法由经典唯象模型推导出宏观 Navier-Stokes 方程, 需要基于微观尺度系统的具体特点建立模型进行描述。
- 弛豫效应。这主要是针对碰撞项来说的, 尤其在电子-声子散射等动量弛豫碰撞的情形下, 碰撞项的模型不应再具有使动量保持守恒性的性质, 因此 *SI-2CA* 模型以及狭义的 (即具有守恒特性的) *RTA* 模型并不适用于这种情形。因此, 这是宏观 Navier-Stokes 方程不再成立, 需要基于微观散射机理得到适当形式的弛豫项添加在方程右端, 从上文可见, 广义的 *RTA* 模型是一个合适的备选。对于该模型来说, 一种合理且足够有效的弛豫时间表达计算的关键式是实现跨尺度计算的关键。
- 多体效应。基于 *SI-2CA* 模型推导的宏观方程, 其基本假设包括二体碰撞假设, 这相当于流体分子之间的相互作用力实际上被简化为了短程的面力, 因此很难直接处理分子间体力 (这里不考虑自洽场以及类似等离激元的集体作用)。因此, 此时的宏观方程并

不适用于多体效应十分显著的情形, 广义 RTA 模型的弛豫时间表达式也需要做较为精细的修正, 此时应该基于量子微观统计模型建立新的理论。

Chapman-Enskog 展开方法 [3,4,8] Chapman-Enskog 方法可导出近局部平衡态的多组分气体混合物的宏观动力学方程, 旨在获得比 Euler 方程组更为普遍的宏观输运方程。该方法是由 Sydney Chapman 和 David Enskog 分别于 1910 年和 1920 年各自独立导出的, 其推导过程实际上是将非平衡分布函数看作 Maxwell-Boltzmann 局部平衡分布附近的微扰的结果, 对某种特定微观碰撞模型下的 Boltzmann 方程进行摄动展开, 从而获得 Navier-Stokes 方程及其输运系数。摄动展开的参数就是所谓的 Knudsen 数, 即 $\varepsilon = Kn$ 。当 $\varepsilon \sim 1$ 或具有更高的量级时, 系统中的气体将不再具有流体的性质。这时, 由 Chapman-Enskog 方法得到的函数序列不再收敛, 而是表征了某种渐进性质, 一个相关的例子是该方法在声波色散关系的研究中的应用。利用 Chapman-Enskog 方法的高级近似, 我们可以系统地导出 Burnett 方程组和高阶 Burnett 方程组, 而这是以往的理论所无法企及的。

宏观方程中粘性耗散的意义 [1,2] 应力张量实际上就是热运动的平均动量通量 $\overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'}$, 且成立 $\overline{\mathbf{v}\mathbf{v}} = \overline{\mathbf{v}\mathbf{v}} + \overline{\mathbf{v}'\mathbf{v}'}$, 其中 $\mathbf{v}' := \mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}$ 为流体微团的热运动速度。类似地, 内能实际上就是热运动速度的平均能量 $\overline{\mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}'}/2$, 且成立 $\overline{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}/2 = \bar{\mathbf{v}} \cdot \bar{\mathbf{v}}/2 + \overline{\mathbf{v}' \cdot \mathbf{v}'}/2$, 其中 $\bar{\mathbf{v}} \cdot \bar{\mathbf{v}}/2$ 即为宏观运动动能。这里的平均都是在空间中某一点对速度空间的平均。由此可见, 所谓粘性耗散其实就是能量在宏观运动动能和内能之间的重新分配, 这本质上源于热运动的平均动量通量, 进一步地, 其各向异性分量的作用。需要注意, 基于 Navier-Stokes 方程来理解粘性的物理意义事实上已经暗含了本构方程这一模型假设, 因此可能会丧失一些物理实在。有趣的是, 这里应力张量的微观表达式与雷诺应力的表达式有一定的相似性, 这或许不仅仅是一种巧合。

References

- [1] 王尚武, 张树发, 马燕云 著. 粒子输运问题的数值模拟. 北京: 国防工业出版社, 2013.
- [2] 张卓敏, 程强 著. 微纳尺度传热. 北京: 清华大学出版社, 2016.
- [3] 栗弗席兹, 皮塔耶夫斯基 著. 物理动理学 (第二版). 北京: 高等教育出版社, 2008.
- [4] 计光华, 计洪苗 著. 微流动及其元器件. XXXXX
- [5] J. Rammer. *Quantum Transport Theory*. Massachusetts: Perseus Books, 1998.
- [6] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- [7] Y. V. Nazarov and Y. M. Blanter. *Quantum Transport: Introduction to Nanoscience*. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
- [8] Wikipedia. Chapman-Enskog Theory.
https://en.wikipedia.org/wiki/Chapman-Enskog_theory.
- [9] G. Karniadakis, A. Beskok and N. Aluru. *Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation*. New York: Springer, 2005.