

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи
УДК 531.19

БЪНЗАРОВА
Надежда Желева

**КОНЕЧНОРАЗМЕРНОЕ ПОДОБИЕ И УНИВЕРСАЛЬНОСТЬ
В РЕШЕТОЧНЫХ ПРОЦЕССАХ ПЕРЕНОСА**

Специальность: 01.04.02 – Теоретическая физика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 2012

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики
им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
профессор В.Б. Приезжев

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук
Н.Е. Савицкая
кандидат физико-математических наук
А.М. Поволоцкий

Ведущая организация: Математический институт им. В.А. Стеклова
Российской Академии Наук

Защита состоится “___” _____ 2012 г. в ___ ч. ___ мин. на заседании
диссертационного совета Д 720.001.01 в Лаборатории теоретической физи-
ки им. Н.Н. Боголюбова Объединенного института ядерных исследований,
141980, г. Дубна, Московская область, ул. Жолио-Кюри, 6.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЛТФ ОИЯИ.

Автореферат разослан “___” _____ 2012 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук А.Б. Арбузов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Объект исследования и актуальность темы.

В диссертации исследуются два типа низкоразмерных процессов переноса - одномерный полностью асимметричный процесс с простым исключением (ПАППИ) и нелинейный диффузионный процесс с открытой границей, который описывает направленную стохастическую модель "sandpile" (песочной кучи). В центре нашего внимания - применимость законов конечноразмерного подобия (конечноразмерного скейлинга) и понятия универсальности в случае неравновесных стационарных систем.

Известно, что фундаментальные свойства равновесных фазовых переходов формулируются в форме законов скейлинга для термодинамических и корреляционных функций. Гипотезы скейлинга утверждают, что сингулярные части этих функций становятся обобщенно-однородными функциями существенных переменных вблизи критической точки. В соответствии с гипотезой универсальности, по отношению к критическому поведению большое количество разнообразных моделей может быть разделено на несколько классов, в зависимости от размерности пространства, симметрии параметра порядка и радиуса взаимодействия (конечный или бесконечный). Универсальность предполагает, что скейлинговые функции одинаковы для всех систем данного класса универсальности, так же как и критические показатели.

С другой стороны, компьютерное моделирование, в духе современных нанотехнологий, изучает системы либо со сравнительно небольшим числом частиц, либо с малым линейным размером, по крайней мере в одном пространственном измерении. Тогда конечноразмерные эффекты становятся существенными и они могут маскировать существование и природу фазовых переходов. Вблизи объемной критической точки, где объемная корреляционная длина становится сравнимой с характерным линейным размером системы, теория конечноразмерного подобия предлагает описание в терминах конечноразмерных скейлинговых функций, универсальность которых зависит, в частности, от формы системы и типа граничных условий.

Асимптотическое поведение этих функций раскрывает глубинный механизм того, как появляются сингулярности в точке равновесного фазового перехода при стремлении размеров системы к термодинамическому пределу. Теория конечноразмерного подобия (КРП) является незаменимым средством анализа смоделированных и экспериментальных данных для конечных систем, так как позволяет сделать надежную экстраполяцию к термодинамическому пределу.

Одна из естественных физических интерпретаций ПАППИ формулируется в терминах автомобильного трафика на единичной полосе. Полностью параллельная динамика считается наиболее подходящей для моделирования реального трафика и она положена в основу более сложных правил обновления конфигураций системы. ПАППИ с параллельным обновлением эквивалентен модели Нейгеля - Шрекенберга с максимальной скоростью $v_{\max} = 1$. Кроме того, ПАППИ и его обобщения имеют многочисленные приложения для описания таких разных явлений, как кинетика биополимеризации, кинетика ионных проводников, перенос пакетов данных в Интернете, рост одномерной междуфазовой границы, образование ударных волн, направленное движение молекулярных моторов вдоль клеточных филаментов, статистическая значимость упорядоченных последовательностей символов и др.

В нашем исследовании конечноразмерного подобия для ПАППИ мы используем то, что теория Ли - Янга о нулях статистической суммы оказывается применимой к нормировочным множителям стационарных вероятностных распределений для некоторых неравновесных процессов с фазовым переходом между неравновесными стационарными фазами. Изучение поведения корней нормирующего множителя для стационарного вероятностного распределения ПАППИ в плоскости комплексной вероятности ввода частиц в модели с возрастающим числом узлов, позволило определить области аналитичности, соответствующие различным неравновесным стационарным фазам. Асимптотика стремления нулей к положительной полуоси с ростом числа узлов оказалась связанной с конечноразмерным смещением квазикритической температуры и позволила оценить критический показатель для корреляционной длины.

В настоящее время довольно много внимания уделяется клеточным автоматам, описывающим трафик на путях с локализованными неоднородностями, моделирующими рампы входа и выхода машин на скоростной дороге. Было показано, что такие пространственные неоднородности приводят к разным динамическим фазам в режиме перегруженного трафика. Подобные исследования сложных сетей дорог или путей необходимы для лучшего понимания реального трафика. Насколько нам известно, случай бифуркаций или соединений эквивалентных дорог рассмотрен нами впервые. Здесь, мы смоделировали поток частиц в сети, состоящей из одной полосы с двойной секцией посередине.

Модели “sandpile”, как простейшие модели самоорганизованной критичности (СОК), вызывают особый интерес при описании лавиноподобной динамики, присущей многим системам в природе. Начиная с первых аналитических попыток вывода критических показателей для изотропных моделей с детерминистическими правилами осыпания выполняется следующая программа. Микроскопическая динамика частиц огрубляется, при сохранении ее основных симметрий. Это порождает нелинейное стохастическое дифференциальное уравнение, содержащее диффузионный член и случайный шум. Нелинейность появляется из-за наличия ступенчатой функции, которая описывает пороговые условия для начала осыпания. Случайный шум бывает двух видов: внутренний консервативный шум, который учитывает проинтегрированные степени свободы и внешний, не консервативный шум, который оказывается существенным для динамики системы. Полученные уравнения могут быть проанализированы с помощью динамичной ренормализационной группы для получения значений критических показателей.

Все известные теории ориентированы на описание фазы роста лавин. Нами впервые сделана попытка проанализировать асимметрию между фазами роста и затухания лавин.

Цель работы.

1. На примере двух типов низкоразмерных процессов переноса исследу-

довать применимость теории конечномерного подобия и понятия универсальности в случае неравновесных фазовых переходов.

2. Изучить одномерный асимметричный процесс с простым исключением с открытыми границами и различными видами динамики. Вывести аналитические выражения КРП для потока частиц в окрестности непрерывного фазового перехода и для локальной плотности числа частиц вблизи фазового перехода первого рода.

3. Численно изучить конечномерное поведение нулей Ли-Янга нормирующего множителя стационарного распределения вероятностей для всех основных видов стохастической динамики, в окрестности фазового перехода как первого, так и второго рода.

4. Смоделировать и исследовать поток частиц в сложной сети, состоящей из двух простых цепей, соединенных между собой двойной секцией.

5. Исследовать морфологию больших направленных лавин и их статистических свойств в зависимости от времени эволюции.

Научная новизна и практическая ценность.

Нами сделана плодотворная попытка расширить понятия равновесной статистической механики на случай неравновесных стационарных процессов переноса. В случае ПАППИ с открытыми границами мы установили, что вблизи непрерывного фазового перехода из фазы с низкой плотностью в фазу максимального потока, аналог равновесной плотности свободной энергии для ПАППИ имеет универсальную форму КРП.

Мы показали, что интерпретацию нормирующего множителя для стационарных вероятностных распределений конфигураций ПАППИ как равновесной статистической суммы для блужданий с одним переходом и двумя типами контактного взаимодействия, можно использовать для определения параметра порядка.

Мы аналитически подтвердили применимость КРП и динамическую универсальность для точно решаемой модели ПАППИ с открытыми границами и разными видами динамики, для которых еще не известны критические классы универсальности. Наши результаты указывают на то, что варианты ПАППИ, основанные на различных правилах обновления, отно-

сятся к одному неравновесному конечноразмерному классу универсальности.

На основе численных результатов для асимптотики сходимости нулей нормирующего множителя вероятностного распределения в комплексной плоскости вероятности ввода частиц к точке фазового перехода бесконечной цепочки, нами оценен критический показатель для корреляционной длины.

Мы изучили ПАППИ на направленной сети с нетривиальной топологией и открытыми границами. Локальные профили плотности, корреляции между ближайшими соседями вдоль составляющих цепочек и кросс-корреляции между эквивалентными узлами принадлежащими двум ветвям средней секции, были численно оценены для значений параметров, соответствующих всем фазам простой цепочки. Присутствие средней секции из двух параллельных цепочек приводит к сложным фазовым структурам стационарного состояния всей сети. Нами обнаружены явные признаки наличия делокализованной доменной стенки, которая имеет различные вероятности быть обнаруженной в головной/хвостовой цепочке и в ветвях средней секции.

В случае направленной стохастической модели песочной кучи, мы расширили теорию Кластера-Маслова-Танга в двух важных аспектах: (1) правила осыпания обобщены учетом процессов переноса одной частицы к ближайшим соседним узлам и (2) простой диффузионный закон роста числа неустойчивых узлов заменен более общим степенным законом, который согласуется с нашими численными результатами.

Нами получено аналитическое решение уравнения Фоккера-Планка с диффузионным коэффициентом в виде сингулярной степенной функции пространственной координаты.

Мы предложили и апробировали новый подход в изучении лавин - оценки их свойств в ограниченном ансамбле лавин с почти фиксированной (с допустимым отклонением 1 процент) продолжительностью, меньшей чем линейный размер решетки во временном направлении. Это позволило изучить статистические свойства подобных лавин во время их полной эволюции. Мы количественно оценили асимметрию ширины фронта лавины

и числа неустойчивых узлов в начальной и финальной стадиях развития. Насколько нам известно, мы впервые показали, что в финальной стадии эволюция лавины может быть описана степенными показателями, различающимися от соответствующих показателей в стадии роста. С помощью метода совмещения данных мы установили существование законов конечноразмерного подобия, описывающих полную эволюцию лавин.

На защиту выдвигаются следующие результаты:

(1) Для одномерного полостью асимметричного процесса с простым исключением на конечной цепочке с открытыми граничными условиями выведены аналитические функции конечноразмерного подобия для (а) аналога равновесной плотности свободной энергии и потока числа частиц в окрестности непрерывного фазового перехода и (б) для локальной плотности числа частиц в окрестности неравновесного фазового перехода первого рода. Установлена универсальность модели по отношению к всем основным видам динамики в дискретном и непрерывном времени.

(2) С помощью численного исследования поведения нулей нормирующего множителя для стационарного распределения вероятностей при всех основных видах стохастической динамики, установлена применимость теории Ли и Янга в окрестности фазового перехода как первого, так и второго рода. Асимптотика стремления ближайшего к вещественной полуоси корня с ростом числа частиц позволила оценить критический показатель для корреляционной длины.

(3) Предложен новый метод анализа полостью асимметричного процесса с простым исключением на сетях с нетривиальной топологией и открытыми границами, основанный на введении эффективных вероятностей ввода и вывода частиц в простых цепях, из которых составлена вся сеть. Получено, что наличие средней секции из двух параллельных цепочек приводит к сложным фазовым структурам стационарного состояния всей сети. Во всех фазах системы изучены локальные профили плотности числа частиц, корреляции между ближайшими соседями вдоль состав-

ляющих цепочек и кросс-корреляции между эквивалентными узлами принадлежащими двум ветвям средней секции. В условиях максимального потока обнаружены явные признаки наличия делокализованной доменной стенки, которая имеет различные вероятности быть обнаруженной в головной/хвостовой части цепочки и в ветвях средней секции.

(4) Развита новый подход к изучению стохастических направленных лавин - оценка их характеристик в ансамбле лавин с почти фиксированной длиной, меньшей чем линейный размер решетки. Таким образом изучены статистические свойства подобных лавин во время их полной эволюции - с момента зарождения до момента затухания. Количественно оценена асимметрия в зависимости от времени ширины фронта и числа нестабильных узлов в начальной и финальной стадиях развития лавин.

(5) Впервые показано, что финальная стадия эволюции лавины может быть описана степенными показателями, различающимися от показателей в стадии роста. С помощью метода совмещения данных установлено существование законов конечноразмерного подобия для полной эволюции лавин.

(6) Выведено аналитическое решение уравнения Фоккера - Планка для зависящей от времени плотности вероятности одномерной случайной величины, в случае неаналитической степенной зависимости коэффициента диффузии от пространственной координаты. С помощью этого решения получена плотность вероятностного распределения для времени первого достижения соответствующего случайного блуждания. Ее асимптотика при больших временах определила значение критического показателя для плотности вероятностного распределения времени жизни лавин в предложенной обобщенной модели.

Апробация работы.

Результаты диссертации докладывались на:

- Bogoliubov Conference “Problems of Theoretical and Mathematical Physics”, Dubna, September 2-6, 2004, Russia.
- Научно-отчетной сессии Института механики Болгарской академии наук, София, 21 января 2005, Болгария.
- Summer School on Fundamental Problems in Statistical Physics XI, Leuven, 4-17 September, 2005, Belgium.
- X Jubilee National Congress on Theoretical and Applied Mechanics, Varna, 13-16 September, 2005, Bulgaria.
- XXII Международных чтениях "Великие преобразователи естествознания: Игорь Курчатов БГУИР, Минск, 27-28 ноября 2008, Беларусь.

Публикации.

Диссертация написана на основании содержания работ 1 - 6.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из пяти глав. Первая глава представляет собой введение, а пятая - заключение, в котором сформулированы выдвигаемые на защиту результаты. Оригинальные научные исследования содержатся во второй, третьей и четвертой главах. Общий объем диссертации 109 страниц машинописного текста, включая 34 рисунков и список литературы из 110 названий.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе (введении) представлен краткий обзор основных работ и результатов по теме исследования двух типов низкоразмерных

неравновесных процессов. Там же кратко описаны основные цели и задачи диссертации, а также полученные новые результаты.

Во второй главе “*Конечномерное подобие и универсальность при неравновесных фазовых переходах*” проверяется применимость теории конечномерного подобия (КРП) в случае неравновесных фазовых переходов на примере точных асимптотических результатов для одномерного полностью асимметричного процесса с простым исключением на цепочке из L узлов с открытыми границами. Частицы перескакивают в соседние пустые узлы справа с вероятностью p . Частица может быть введена в левый конец цепочки с вероятностью α и удалена из правого конца с вероятностью β . Установлено, что вблизи точки фазового перехода $\alpha = \alpha_c$ между стационарными фазами низкой плотности и максимального потока, аналог равновесной плотности свободной энергии имеет универсальную форму КРП, как функции переменной $x = C_1 t L^{1/2}$, где $t := (\alpha - \alpha_c) / \alpha_c \rightarrow 0$ и $L \rightarrow \infty$, так что $x = O(1)$. Параметры C_1 и α_c различны для дискретной и непрерывной во времени динамики. Современная интерпретация нормирующего множителя Z_L для вероятностных распределений стационарного состояния, как равновесной статистической суммы взвешенных решеточных путей, используется для определения нового параметра порядка соответствующего КРП с новым критическим показателем.

Продолжены и расширены предыдущие исследования полностью асимметричного процесса с простым исключением в отношении законов конечномерного подобия и универсальности, а также проверили имеют ли конечномерные функции ПАППИ с другими типами дискретной динамики - последовательно ориентированной, подрешеточно-параллельной и полностью параллельной, универсальный вид. При этом универсальность понималась как независимость характеристик неравновесного стационарного состояния от деталей стохастической динамики, управляющей эволюцией системы во времени. Основное внимание было уделено возможным определениям неравновесного параметра порядка. Нами получены аналитические выражения для конечномерного подобия потока числа частиц вблизи непрерывного фазового перехода и для локальной плотности числа

частиц вблизи неравновесного фазового перехода первого рода, в случаях стохастической динамики как с непрерывным временем, так и в основных вариантах обновления в дискретном времени.

В теории Ли-Янга для неравновесных фазовых переходов, отличная от нуля плотность корней на положительной вещественной полуоси в термодинамическом пределе свидетельствует о неравновесном фазовом переходе первого рода, а ее линейное убывание - о неравновесном фазовом переходе второго рода. Это обстоятельство мотивировало проведенное в первой главе численное исследование поведения нулей нормирующего множителя стационарного распределения вероятностей для всех основных видов стохастической динамики в окрестности фазового перехода как первого, так и второго рода. Нами исследована асимптотика стремления с ростом числа частиц ближайшего к вещественной полуоси корня и показано, что она определяет критический показатель объемной корреляционной длины.

В третьей главе *“Полностью асимметричный процесс с простым исключением на сети с двойной секцией посередине: компьютерное моделирование и теория”* рассматривается ПАППИ со случайно-последовательным алгоритмом обновления конфигураций на сети, состоящей из двух простых цепочек, одним концом присоединенных к двум параллельным цепочкам посередине (т. наз. двойной секции). Внешние узлы простых цепочек являются открытыми, так что частицы вводятся слева с вероятностью α и выводятся справа с вероятностью β . В точке бифуркации сети (левый конец двойной секции) частицы выбирают с равной вероятностью $1/2$ по какой ветви продолжить свое движение. Проведено компьютерное моделирование системы при одновременном движении частиц по двум ветвям. Предложен новый метод анализа, основанный на введении эффективных вероятностей перехода для отдельных сегментов составляющих сеть, при пренебрежении корреляциями в точках соединения. Таким образом определена возможные фазовые структуры модели. Получены и обсуждены профили плотности числа частиц и корреляции между ближайшими соседними узлами в стационарном состоянии модели в представительных точках фазовой диаграммы. Обнаружено существова-

ние кросс-корреляций между эквивалентными узлами двух ветвей средней секции сети, в случае когда они находятся в фазе сосуществования.

В четвертой главе *“Статистические свойства направленных лавин”* представлены результаты численного и аналитического исследования направленной стохастической модели песочной кучи (“sandpile”). Рассмотрена двумерная направленная модель “sandpile” со стохастическими правилами осыпания и диссипацией на границе, с целью более детального изучения морфологии больших направленных лавин и ее влияние на их статистические свойства за все время эволюции. Для этого предложен новый подход: вычисление основных характеристик по ансамблю лавин с почти фиксированным временем жизни (т.е. длины), которое меньше чем длина решетки во временном направлении. Этот подход открывает перспективу определения новых наборов скейлинговых законов для конечного этапа эволюции лавин, а также возможности альтернативных значений фрактальной размерности всей лавины.

Критически проанализированы два известных аналитических подхода. Теория расширена с включением более общих стохастических правил осыпания. Для стохастического процесса, описываемого нелинейным уравнением Ланжевена со степенной зависимостью диффузионного коэффициента, получено распределение плотности вероятности времени первого достижения. Прделаны крупномасштабные Монте-Карло симуляции с целью проанализировать аналитические свойства лавин, такие как асимметрия между начальной и конечной фазами эволюции, скейлинг ширины "дырок" из устойчивых узлов во фронте лавины, так же как и ширины самой широкой ветви ("хребта") лавины. Описано сравнение со случайным блужданием и предложены возможные варианты эволюции лавин и значений степенных показателей в начальной и конечной точках её эволюции.

В пятой главе (заключении) кратко сформулированы полученные в диссертации результаты, которые и выносятся на защиту.

По теме диссертации опубликованы следующие работы

1. J. Brankov, N. Pesheva and N. Bunzarova,
Totally asymmetric exclusion process on chains with a double-chain section in the middle: Computer simulations and a simple theory,
Phys. Rev. E **69**, 066128 1–13 (2004).
2. J. G. Brankov and N. Zh. Bunzarova,
Finite-size scaling and universality at non-equilibrium phase transitions,
Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei, **36**, No. 7A, 174–182
(2005).
3. J. Brankov and N. Bunzarova,
Finite-size scaling and universality for the totally asymmetric simple-exclusion process,
Phys. Rev. **71**, No. 3, 036130 1–10 (2005).
4. J. Brankov, N. Pesheva and N. Bunzarova,
One-dimensional traffic-flow models: Theory and computer simulations,
In: Proceedings of the X Jubilee National Congress on Theoretical and Applied Mechanics, Varna, 13–16 September 2005, pp. 442–456;
cond-mat arXiv:0803.2625.
5. J. Brankov and N. Bunzarova,
Finite-size scaling and universality at non-equilibrium phase transitions revisited,
J. Theor. Applied Mech. (Sofia) **36**, No. 1, 57–76 (2006).
6. N. Zh. Bunzarova,
Statistical properties of directed avalanches,
Phys. Rev. E **82**, 031116 1–14 (2010).