

一维几率性细胞自动机演化的 临界相变现象分析

吕晓阳 孔令江 陈光旨

广西师范大学物理系, 桂林, 541001

1989 年 2 月 22 日收到

本文用实位置空间重整化群方法对一类特殊的一维几率性细胞自动机演化的动力学方程进行了处理, 得到该细胞自动机的演化存在相变, 其临界点几率参数值为 $P_0 = 0, P_1 = P_2 = 0.5$, 临界动力学指数 $\alpha = 2$, 并获得了大量的计算机实验资料.

PACC: 0540; 7540; 6460; 0270

一、引 言

细胞自动机 (Cellular Automata, 以下简称 CA) 的理论与应用已得到较为广泛的研究^[1-6]. CA 是由大量简单的、具有局域相互作用的“元件”所构成的一种离散性(包括空间、状态、时间)数学模型. 考虑在一维无限直线上均匀地排列着格点, 各格点在某一时刻只能取一些分立值, 在下一时刻所有格点按某种规则同步更新. 若该规则明确给出格点的取值, 则构成确定性细胞自动机 (DCA). 若规则只给出格点取某些值的几率, 则得到几率性细胞自动机 (PCA).

CA 在一步紧接一步直至无穷的演化过程中存在临界相变现象. CA 演化的相变理论是 CA 最重要的基本理论之一. 有很多作者在这方面做了大量的工作. Kinzel^[7] 利用变换矩阵及有限标度理论较详细地论述了一维 PCA 的临界现象, 提出了“吸收态”(absorbing)概念. Grinstein^[8] 从统计力学角度讨论了 PCA 的微观可逆热力学性质, 并用平均场理论分析了不可逆 PCA 的平衡态临界现象, 预言某些 PCA 将有混沌态的出现. Choi^[9] 研究了一种特殊的一维 PCA 模型, 证明该模型存在临界相变现象, 相变点的几率控制参数满足 $P_1 + P_2 = 1$. 但该文没有对相变点附近 PCA 的行为作深入分析, 因而没有确定临界参数的具体值, 也没有实验上的佐证. 本文采用实空间重整化群方法重新对文献 [9] 的 PCA 模型在两状态参数的特殊情况下进行了处理, 发现在满足 $P_1 + P_2 = 1$ 的众多几率控制参数里, 只有 $P_1 = P_2 = 0.5$ 是实际的临界参数值, 还进一步求得了 PCA 演化的临界动力学指数. 计算机实验结果支持了本文的结论.

二、特殊 PCA 模型与演化方程

考虑由 N 个格点组成的等间距一维直线链系统, 每个格点可取两个状态值 $\sigma_i = \pm 1$

($i = 1, 2, \dots, N$). 系统的状态可由 N 数串表为 $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$, 各格点的取值随时间变化, 但受到它最近邻的左右两格点取值的制约. 所有格点值有秩序的变化就构成了系统演化的动力学图景. 规定如下特殊的演化方式, 在偶数时间 $t = 2n$ ($n = 0, 1, \dots$), 奇数下标的格点统一改变状态. 这种改变由它们的邻居(偶数下标)在时刻 $t - 1$ 的状态决定. 而偶数下标的格点状态暂且不变. 同理在奇数时间 $t = 2n + 1$, 只是偶数下标的格点改变状态. 用公式可表为

$$\begin{aligned} \sigma_i(t) &= f\{\sigma_{i-1}(t-1), \sigma_{i+1}(t-1)\} & i+t = \text{奇数}, \\ \sigma_i(t) &= \sigma_i(t-1) & i+t = \text{偶数}. \end{aligned} \quad (1)$$

其中 f 给出格点取可能值 ± 1 的几率.

令 $P(\alpha, t)$ 是系统在时刻 t 处于状态 $\alpha = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ 的几率, $w(\alpha \rightarrow \beta)$ 是由状态 α 跃迁到状态 β 的跃迁速率, 它可由系统的各单个条件几率 $P(\sigma'_i(t) | \sigma_{i-1}(t-1), \sigma_{i+1}(t-1))$ 的乘积表示出来. 该条件几率表示 $t-1$ 时刻格点 $i-1$ 和 $i+1$ 分别取状态 $\sigma_{i-1}(t-1), \sigma_{i+1}(t-1)$ 时, 格点 i 在 t 时刻取状态 $\sigma'_i(t)$ 的几率.

$$w(\alpha \rightarrow \beta) = w(\beta, t | \alpha, t-1) = \prod_i P(\sigma'_i | \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}) \delta_{\sigma'_{i-1}, \sigma_{i-1}}. \quad (2)$$

其中 $\beta = (\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N)$, 乘积中的上撇表示限制条件(1)式. 考虑到离散时间 $\Delta t = 1$, 于是系统演化的主方程为

$$\begin{aligned} P(\alpha, t) - P(\alpha, t-1) &= \sum_{\beta} [w(\beta \rightarrow \alpha) P(\beta, t-1) \\ &\quad - w(\alpha \rightarrow \beta) P(\alpha, t-1)]. \end{aligned} \quad (3)$$

定义下述两个量:

(1) 格点 k 在时刻 t 处于状态 μ 的平均几率

$$\langle \delta_{\mu\sigma_k} \rangle_t = \sum_{\{\sigma_i\}} \delta_{\mu\sigma_k} P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N, t). \quad (4)$$

(2) t 时刻格点 j 和 k ($|j-k| = \text{偶数}$) 处于同一状态 μ 的平均几率

$$\langle \delta_{\mu\sigma_j} \delta_{\mu\sigma_k} \rangle_t = \sum_{\{\sigma_i\}} \delta_{\mu\sigma_j} \delta_{\mu\sigma_k} P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N, t). \quad (5)$$

第一个量就是描述系统有序化程度的序参量. 第二个量与纯空间关联有关.

规定条件几率 $P(\sigma'_i | \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1})$ 满足方程

$$P(\sigma'_i | \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}) = P_0 + P_1 \delta_{\sigma'_i \sigma_{i-1}} + P_2 \delta_{\sigma'_i \sigma_{i+1}}. \quad (6)$$

归一化条件为

$$\sum_{\{\sigma'_i\}} P(\sigma'_i | \sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}) = 1, \quad (7)$$

即

$$2P_0 + P_1 + P_2 = 1. \quad (8)$$

其中 P_0, P_1, P_2 是可控几率参数, 只有两个能独立变化. 将(6)式代入(4)式, 且利用主方程(3), 得到序参量的递推关系为

$$\langle \delta_{\mu\sigma_k} \rangle_t \equiv U_k^\mu(t) = \begin{cases} U_k^\mu(t-1) & k+t = \text{偶数}; \\ P_0 + P_1 U_{k-1}^\mu(t-1) + P_2 U_{k+1}^\mu(t-1) & k+t = \text{奇数}. \end{cases} \quad (9)$$

本文中(6)式的 σ_i 只取 ± 1 两个值, σ_i 可取多个整数值(如文献[9])时, 条件几率仍可按(6)式规定, 递推公式亦得出与(9)式相同的结果. 文献[9]中利用生成函数

$$F^u(\lambda, t) = \sum_i \lambda^i U_i^u(t)$$

解析地求出了 $U_i^u(t)$ 与初始值 $U_i^u(0)$ 的关系及随时间变化规律. 同时只考虑平衡极限解, 假定 $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \delta_{\mu\sigma_j} \delta_{\mu\sigma_k} \rangle_t = R_{jk}$ 得到等时相关函数

$$R_{jk}^u \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \delta_{\mu\sigma_j} \delta_{\mu\sigma_k} \rangle_t = \frac{1}{4} = \frac{1}{4} \eta^{|j-k|}, \quad (10)$$

其中 $|j-k|$ = 偶数.

$$\eta = \frac{[1 - (P_1 - P_2)^2]^{1/2} - [1 - (P_1 + P_2)^2]^{1/2}}{2(P_1 P_2)^{1/2}} (\leq 1). \quad (11)$$

由(11)式可以看出, 若 $\eta \neq 1$ 或 $P_0 \neq 0$, 则 R_{jk}^u 随格点 j 和 k 间的距离指数地衰减, 因此系统的演化只可能在满足 $P_0 = 0$, $P_1 + P_2 = 1$ 的点发生相变, 此时(10)式不随间距变化, 系统呈现出长程有序.

三、动力学方程的重整化处理

将原来的递推关系(9)式写成

$$\begin{aligned} \Delta U_k^u(t) \equiv U_k^u(t) - U_k^u(t-1) = & -U_k^u(t-1) + P_0 \\ & + P_1 U_{k-1}^u(t-1) + P_2 U_{k+1}^u(t-1). \end{aligned} \quad (12)$$

对格点 $k-1$ 和 $k+1$ 同样可写出递推式

$$\Delta U_{k-1}^u(t) = -U_{k-1}^u(t-1) + P_0 + P_1 U_{k-2}^u(t-1) + P_2 U_k^u(t-1), \quad (13)$$

$$\Delta U_{k+1}^u(t) = -U_{k+1}^u(t-1) + P_0 + P_1 U_k^u(t-1) + P_2 U_{k+2}^u(t-1). \quad (14)$$

联合(12)至(14)式, 得到

$$\begin{aligned} \Delta^2 U_k^u(t+1) + 2\Delta U_k^u(t) + (1 - 2P_1 P_2) U_k^u(t-1) \\ = P_0(1 + P_1 + P_2) + P_1^2 U_{k-2}^u(t-1) + P_2^2 U_{k+2}^u(t-1), \end{aligned} \quad (15)$$

其中二阶差分是

$$\Delta^2 U_k^u(t+1) = U_k^u(t+2) - 2U_k^u(t+1) + U_k^u(t). \quad (16)$$

在 t 很大 ($t \rightarrow \infty$) 时, 把差分方程看作微分方程, 与(12), (15)式对应得

$$\frac{d}{dt} U_k^u(t) + U_k^u(t) = P_0 + P_1 U_{k-1}^u(t) + P_2 U_{k+1}^u(t), \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} U_k^u(t) + 2 \frac{d}{dt} U_k^u(t) + (1 - 2P_1 P_2) U_k^u(t) \\ = P_0(1 + P_1 + P_2) + P_1^2 U_{k-2}^u(t) + P_2^2 U_{k+2}^u(t). \end{aligned} \quad (18)$$

对(17), (18)两式作傅氏变换有

$$-i\omega U_i^u(\omega) + U_i^u(\omega) = P_0 \delta(\omega) + P_1 U_{i-1}^u(\omega) + P_2 U_{i+1}^u(\omega), \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
& -i\omega \left(\frac{2-i\omega}{1-2P_1P_2} \right) U_i^*(\omega) + U_i^*(\omega) \\
& = P_0 \frac{1+P_1+P_2}{1-2P_1P_2} \delta(\omega) + \frac{P_1^2}{1-2P_1P_2} U_{i-2}^*(\omega) \\
& \quad + \frac{P_2^2}{1-2P_1P_2} U_{i+2}^*(\omega). \tag{20}
\end{aligned}$$

其中

$$U_i^*(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} U_i^*(t) e^{i\omega t} dt, \quad \delta(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt. \tag{21}$$

考察(19)式与(20)式发现, (20)式可看作由(19)式经一次实位置空间重整化群变换所得. 空间变换因子为 $b = 2^{[10,11]}$. 若令

$$\omega' = \omega \frac{2-i\omega}{1-2P_1P_2}, \tag{22}$$

$$P_0' = P_0 \frac{1+P_1+P_2}{1-2P_1P_2}, \tag{23}$$

$$P_1' = P_1 \frac{P_1}{1-2P_1P_2}, \tag{24}$$

$$P_2' = P_2 \frac{P_2}{1-2P_1P_2}, \tag{25}$$

则方程(20)与(19)有完全相同的形式, 方程(22)至(25)即为有关参数的递推关系.

由方程(21)至(25)得到与时间演化无关的可能不动点有

$$P_0 = 0, \quad P_1 = P_2 = 0, \tag{26}$$

$$P_0 = 0, \quad P_1 = P_2 = 0.5, \tag{27}$$

$$P_0 = 0, \quad P_1 = 1, \quad P_2 = 0, \tag{28}$$

$$P_0 = 0, \quad P_1 = 0, \quad P_2 = 1. \tag{29}$$

且由 $P_1 + P_2 = 1$, 得 $P_1' + P_2' = \frac{P_1^2 + P_2^2}{1-2P_1P_2} = 1$. (30)

即在直线 $P_1 + P_2 = 1$ 上的点迭代后仍在该直线上, 方程(22)至(25)表明参数, P_1, P_2 与 P_0 无关地在 (P_1, P_2) 平面上移动, 不动点附近的行为由迭代关系(24), (25)式确定. 其各类偏导数为

$$\frac{\partial P_1'}{\partial P_1} = \frac{2P_1(1-P_1P_2)}{(1-2P_1P_2)^2}, \tag{31}$$

$$\frac{\partial P_1'}{\partial P_2} = \frac{2P_1^2}{(1-2P_1P_2)^2}, \tag{32}$$

$$\frac{\partial P_2'}{\partial P_2} = \frac{2P_2(1-P_1P_2)}{(1-2P_1P_2)^2}, \tag{33}$$

$$\frac{\partial P_2'}{\partial P_1} = \frac{2P_2^2}{(1-2P_1P_2)^2}. \tag{34}$$

现考虑可能的四个不动点的性质.

(1) 点 $P_0 = 0, P_1 = P_2 = 0$ 对 PCA 的演化无意义, 因为由归一化条件(7)式, 在 $P_0 = 0$ 时必有 $P_1 + P_2 = 1$. 但在 $P_0 \approx 0$ 的平面, $P_1 = P_2 = 0$ 暗示 $P_0 = 1/2$, 这时的 PCA 演化规则(6)式给出完全均等的条件几率, 相应于热力学系统的无限大温度状态. 在相图(图 1)中, 点 $(1/2, 0, 0)$ 是一个常驻不动点就反映了该特性.

(2) 点 $P_0 = 0, P_1 = P_2 = 0.5$ 是一个相变点. 在该点由 (31) 至 (34) 式得出

$$\frac{\partial P'_1}{\partial P_1} = \frac{\partial P'_2}{\partial P_2} = 3, \quad \frac{\partial P'_1}{\partial P_2} = \frac{\partial P'_2}{\partial P_1} = 1.$$

其附近的线性重整化群变换矩阵为

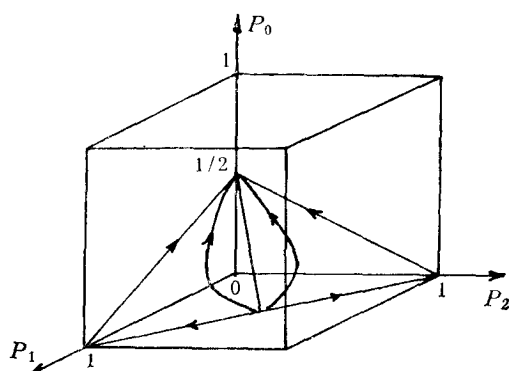


图 1 参数空间 (P_0, P_1, P_2)

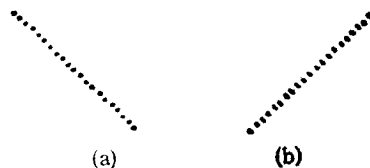


图 2 DCA 240 与 170 号规则的演化

$$\begin{pmatrix} \delta P'_1 \\ \delta P'_2 \end{pmatrix} = R_s^L \begin{pmatrix} \delta P_1 \\ \delta P_2 \end{pmatrix}, \quad (35)$$

$$R_s^L = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}. \quad (36)$$

本征值 $\lambda_{1,2} = 4, 2$. 表明 P_1, P_2 都是关涉量. 但该点不是一个稳定不动点, 实际上它相当于热力学系统的绝对零温度. 处在该点的 PCA 存在两个“吸收态”, 即 $(-1, -1, \dots, -1)_N, (1, 1, \dots, 1)_N$.

(3) 点 $(0, 1, 0)$ 是 $P_1 + P_2 = 1$ 直线上的稳定不动点, 但此时由于 P_2 不是关涉量故不是相变点. 它对应 Wolfram^[1] 的 DCA240 号规则, 对单个“1”值初始位形的演化就像一个右移器一样(图 2(a)).

(4) 同理, 点 $(0, 0, 1)$ 也是个平庸点, 它对应 Wolfram^[1] 的 DCA 170 号规则(图 2(b)).

此外, 在直线 $P_1 + P_2 = 1$ 上的其它任何点都是不稳定点. 例如 $(1/4, 3/4) \rightarrow (1/10, 9/10) \rightarrow (1/82, 81/82) \rightarrow \dots \rightarrow (0, 1)$, $(3/4, 1/4) \rightarrow (9/10, 1/10) \rightarrow (81/82, 1/82) \rightarrow \dots \rightarrow (1, 0)$. 因此尽管直线 $P_1 + P_2 = 1$ 在重整化群变换下保持不变, 但唯一可能的相变点只能是 $(0.5, 0.5)$, 后面的计算机实验证实了这一观点.

四、动力学指数的精确值

按传统理论,序参数 k 傅氏分量的寿命 $\tau(k)$ 定义为^[12]

$$\tau(k) = \chi(k)/D. \quad (37)$$

其中 $\chi(k) = \langle \sigma_k \sigma_{-k} \rangle$ 是序参数的 k 分量磁化量, D 是输运系数, 此结果由动力学标度假设所推广^[13,14], 定义动力学指数 z 满足

$$\tau(k) \sim \xi^2 F(k\xi). \quad (38)$$

其中 ξ 是关联长度, $F(k\xi)$ 是某些通用函数. τ 与 ξ 的关系表明在空间的重新标度下“寿命”也将重新标度. 这样, 运动方程在空间和特征时间的同时重新标度下保持不变.

由方程(19), (20)和(22)至(25)可知, 在标度因子 $b = 2$ 的空间重新标度下, 再作时间重新标度, 运动方程(19)保持不变. 通过时间重新标度 $t' = tb^{-z'}$ 引入临界指数 z' , z' 即为动力学指数 z . 将(22)式线性化.

$$\omega' = \frac{2}{1 - 2P_1P_2} \omega, \quad (39)$$

得

$$z = \log_b \frac{2}{1 - 2P_1P_2}. \quad (40)$$

代入 $b = 2$ 及临界点参数值 $P_1 = P_2 = 0.5$, 得

$$z = 2. \quad (41)$$

注意到在方程(12)中, t 时刻的 U_k^* 值只与 $t - 1$ 时刻的 U_k^* 值有关, 故是 Markov 方程. 但作过一次迭代后得到的方程(15)不再是一个 Markov 方程, 表现在微分方程(18)中就是 $(-i\omega)^2/(1 - P_1P_2)$ 项的出现, 它标志记忆效应的存在. 这些短暂的记忆效应相当于一个短时标度^[15], 在实空间重整化步骤里通过在初始参数里就引进对时间导数的各种系数, 且考虑到裸时间标度应为“边缘变量”, 可略去引起记忆效应的二次项, 仍得出 $z = 2$.

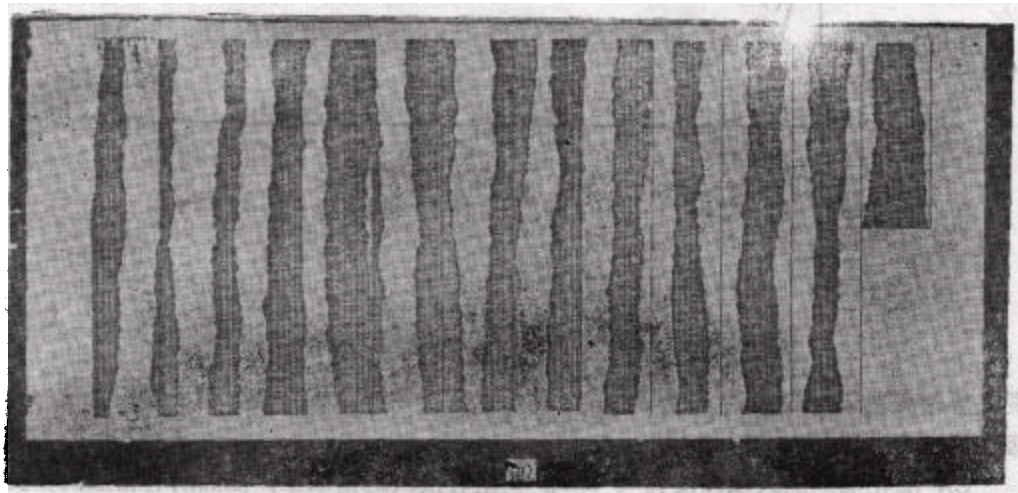
五、计算机实验结果

在临界点, 特征时间 $\tau \sim \xi^2 \sim (P_c - P)^{-2}$ 趋向无限大, 此时 PCA 的演化规律为

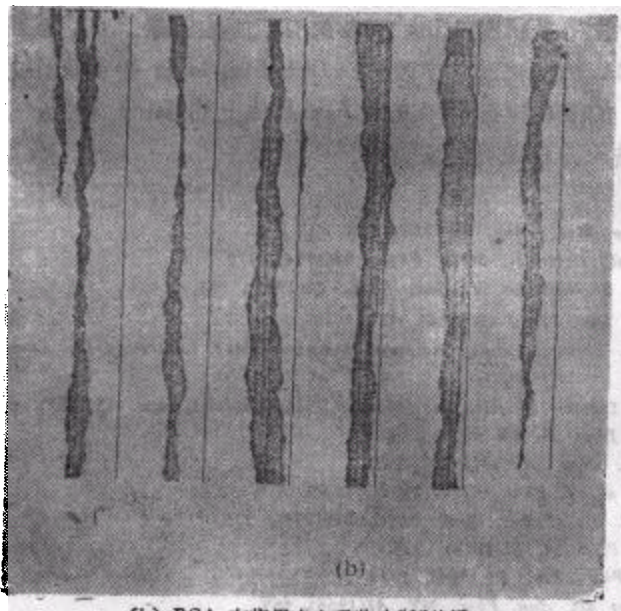
$$\begin{aligned} P(-1|1, 1) &= P(1|-1, -1) = 0, \\ P(1|-1, 1) &= P(1|1, -1) = 0.5, \\ P(1|1, 1) &= P(-1|-1, -1) = 1. \end{aligned} \quad (42)$$

在计算机实验中, 让一维 PCA 满足周期边界条件, 以便在有限时间步骤内有效地观察随机初始位形的演化情况. 从计算机所作图形发现当几率控制参数 $P_1 = P_2$ 自 0 向 0.5 趋近过程中, 演化图象明显地从无序向有序过渡, 系统逼向吸收态, 标志了相变的发生. 图 3 给出了两个随机初始形在临界点向吸收态演化的图景. 经过相当长时间系统随机地到达两个吸收态中的一个. 图 3(a) 表示系统经 2197 步到达吸收态 $(1111 \cdots 1)_N$. 图

3(b) 表示系统经 1136 步到达吸收态 $(-1, -1, -1, \dots, -1)_N$ 。实验表明, 系统在临界点趋向吸收态的弛豫时间与系统的尺寸有关, 这是有效尺寸效应的体现。大量的计算机模拟中, 弛豫时间随系统尺寸的增大显著地变长, 显示出“临界慢化”现象。



(a) PCA 在临界点向吸收态“1”趋近



(b) PCA 在临界点向吸收态“0”趋近

图 3

图 4 是按公式 $c(r) = \langle \sigma(r_0)\sigma(r_0 + r) \rangle - \langle \sigma(r_0) \rangle \langle \sigma(r_0 + r) \rangle$ 通过数值计算得到的关联函数随两点间距离变化图。可见在临界点, $c(r)$ 渐渐稳定在 -0.25 附近, 绝对值与(10)式给出的相接近。表明 PCA 系统内出现了长程有序。此时关联长度 ξ 趋向无穷。

综上所述, 本文所讨论的一维特殊 PCA 在时间演化进程中随控制参数的改变将出

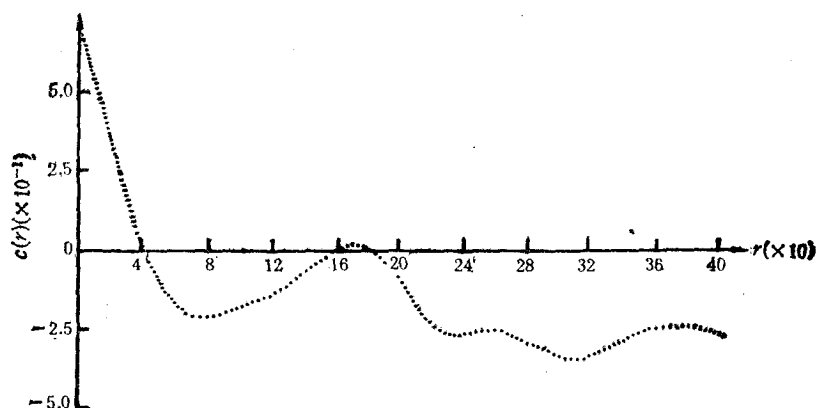


图 4 关联函数 $c(r)$ 随两点间距离的变化

现临界相变现象。临界点、临界慢化,以及长程有序等理论和实验表明了该相变是一个二级连续相变^[16,17]。

CA 演化规则的区域性使其与 Ising 模型有很大的相似性,然而所有格点同步更新的 CA 动力学不能直接等同于 Ising 模型,但我们可以赋予每个格点四个状态或让各相邻格点交替地更新,这样就可以把 CA 位形相应地与 Ising 状态的分布对应起来。利用 CA 计算上的并行优势来研究 Ising 问题具有广阔的前景。CA 描述 Ising 模型的数学方法是将在 D 维 PCA 的演化动力学映射到 $D+1$ 维 Ising 平衡统计力学上。我们利用二维正方格子 PCA 的演化构造出了三维 bcc 晶体上的 Ising 模型,并在计算机上模拟,得到了一些初步结果。对此将另文讨论。

- [1] S. Wolfram, *Rev. Mod. Phys.*, **55**(1983), 601.
- [2] O. Martin *et al.*, *Commun. Math. Phys.*, **93**(1984), 170.
- [3] N. H. Packrd, S. Wolfram, *J. Stat. Phys.*, **38**(1985), 901.
- [4] S. Wolfram, *J. Stat. Phys.*, **45**(1986), 471.
- [5] N. Margolus, T. Toffili, *Cellular Automata Machines*, MIT Laboratory for Computer Science, Cambridge MA(1987).
- [6] B. Hasslacher, *Discrete Fluids*, Los Alamos Science Special Issue. **15**(1987), p. 175.
- [7] W. Kinzel, *Z. Phys. B*, **58**(1985), 229.
- [8] G. Grinstein, *J. Phys. A*, **13**(1980), L20.
- [9] M. Y. Choi *et al.*, *J. Phys. A*, **17**(1984), L765.
- [10] Dr. Nelsen and Me. Fisher, *Ann. Phys.*, **91**(1975), 226.
- [11] A. Yaakov, *J. Phys. A*, **11**(1978), 975.
- [12] L. Van Hove, *Phys. Rev.*, **93**(1954), 1374.
- [13] R. A. Ferrell *et al.*, *Ann. Phys. NY*, **47**(1968), 565.
- [14] B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.*, **177**(1969), 952.
- [15] S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.*, **37**(1976), 461.
- [16] G. Y. Vichniac *et al.*, *J. Stat. Phys.*, **45**(1986), 875.
- [17] 郝柏林、于渌等,统计物理学进展,科学出版社,(1981), 82 页。

AN ANALYSIS OF THE CRITICAL PHASE TRANSITION PHENOMENA OF ONE-DIMENSION PROBABILITY CELLULAR AUTOMATA EVOLUTION

LÜ XIAO-YANG KONG LING-JIANG CHEN GUANG-ZHI

Department of Physics, Guangxi Teacher's University, Guilin, 541001

(Received 22 February 1989)

ABSTRACT

The dynamic equation of one-dimension probability cellular automata evolution is studied by means of real space renormalization group method. The phase transition phenomena in the cellular automata evolution are observed. The probability parameters at the critical point take values $P_0 = 0$, and $P_1 = P_2 = 0.5$. The critical index $z = 2$. A large number of data are obtained with computer.

PACC: 0540; 7540; 6460; 0270