

用细胞自动机方法构造非平衡相变模型

李 富 斌¹⁾

华东理论物理研究所, 上海 200237

1991 年 11 月 15 日收到

阐述了一旦给定细胞自动机方法的法则, 将如何构造实际问题的物理学模型的方法, 并用此法构造出非平衡相变模型。同时对类平均场近似方法进行了讨论, 并将其预言与非平衡相变模型的精确的数值结果进行了比较。

PACC: 6400; 4770; 0520

一、引 言

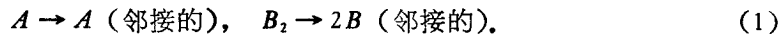
细胞自动机是一个简化的离散动力学系统。它能表示出由系统各组成部分间的合作效应所引起的系统的十分复杂的特性。因而细胞自动机对模型化的物理系统提供了一种强有力的工具。本文用细胞自动机方法构造了非平衡相变模型。

二、模 型

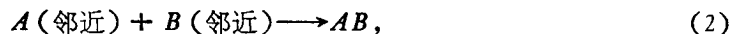
由于我们考虑到表面反应模型非常类似于 1986 年由 Ziff 等人所提出的模型^[1], 所以这两种模型之间的差别便可通过细胞自动机方法的模型化来加以说明。这些反应模型都是依据晶体表面上的反应 $A+B_2$ (例如 $CO+O_2$) 的某些已知阶段而提出的。在不均匀晶体中的基本阶段如下:

1. 在不均匀晶体表面上, B_2 点的气体混合物浓度为 X_{B_2} , A 点的气体混合物浓度为 $X_A = (1 - X_{B_2})$, 而且均可被吸收。上述表面也可分割为若干元胞, 而且每个元胞只能吸收一个原子。

2. B 种只可能以原子形式被吸收; 当分子接近一个空胞时, 如果邻接第一个元胞的另一个元胞是空的, 则该分子 B_2 便只能离解成两个 B 原子。这两种情形的第一阶段相应于如下的反应:



3. 如果两个最邻近的元胞由不同种类的原子所占据, 则它们便发生如下的化学反应:



而且反应产物会被吸收。这最后的吸收阶段是必要的, 否则反应产物会恢复原状并且晶

1) 中国高等科学技术中心世界实验室, 北京 100080.

体也会重新生成。但需假定气体的上述表面会被新的物质重新填满。这样一来,在整个演化期间内,气体的组成将是恒定不变的。

值得注意的是,该模型忽略了其中的几种特性。这些特性在实际情形中是存在的。

三、细胞自动机的模型化

依据上述观点,用一个两维细胞自动机来描述实际问题似乎是十分自然的。

细胞自动机的细胞相应于晶体的元胞。每个元胞 i 可有 4 种不同的状态: $|\phi_i\rangle = |0\rangle, |A\rangle, |B\rangle$ 或 $|C\rangle$ 。

状态 $|0\rangle$ 相应于一个空胞;状态 $|A\rangle$ 是一个被原子 A 所占据的元胞;状态 $|B\rangle$ 是一个被原子 B 所占据的元胞;状态 $|C\rangle$ 描述了元胞被原子 B 所占据的条件。该条件意味着在细胞自动机的下一步演化阶段,状态 $|C\rangle$ 将变为状态 $|B\rangle$ 或状态 $|0\rangle$,这种变化依赖于如下的条件: 当一个最邻近的元胞是空着的时候,它就会准备接受由分子 B_2 离解出的第二个原子 B 。这个有条件的状态必定能描述表面上 B_2 分子的离解过程。

细胞自动机的时间演化是由如下的一组法则给出的。若在时间 $(t+1)$ 时,固定元胞 i 的状态,则 $|\phi_i\rangle(t+1)$ 便可作为元胞 i 的一个状态函数,而且在时间 t 时,元胞 i 的最近邻域 (Von Neumann 邻域),将有如下法则:

$$R1: \text{若 } |\phi_i\rangle(t) = |0\rangle, \text{ 则 } |\phi_i\rangle(t+1) = \begin{cases} |A\rangle, & (\text{概率为 } X_A), \\ |C\rangle, & (\text{概率为 } (1 - X_A)); \end{cases} \quad (3)$$

$R2: \text{若 } |\phi_i\rangle(t) = |A\rangle, \text{ 则}$

$$|\phi_i\rangle(t+1) = \begin{cases} |0\rangle, & (\text{若元胞 } i \text{ 的最邻近元胞中最末端一个} \\ & \text{在时间 } t \text{ 时处于状态 } |B\rangle), \\ |A\rangle, & (\text{在其它情况下}); \end{cases} \quad (4)$$

$R3: \text{若 } |\phi_i\rangle(t) = |B\rangle, \text{ 则}$

$$|\phi_i\rangle(t+1) = \begin{cases} |0\rangle, & (\text{若元胞 } i \text{ 的最邻近元胞中最末端一个} \\ & \text{在时间 } t \text{ 时处于状态 } |A\rangle), \\ |B\rangle, & (\text{在其它情况下}); \end{cases} \quad (5)$$

$R4: \text{若 } |\phi_i\rangle(t) = |C\rangle, \text{ 则}$

$$|\phi_i\rangle(t+1) = \begin{cases} |0\rangle, & (\text{若元胞 } i \text{ 的最邻近元胞中最末端一个} \\ & \text{在时间 } t \text{ 时处于状态 } |C\rangle), \\ |B\rangle, & (\text{在其它情况下}). \end{cases} \quad (6)$$

该法则表达了如下的事实: 仅当 B_2 分子被离解为两个相邻近的元胞,即仅当最末端的两相邻近的元胞在时间为 $(t-1)$ 时均为空胞,则 B_2 分子离解后的原子就会被吸收。

上述法则 $R1, R4$ 描述了吸收-离解机制,而法则 $R2, R3$ 则描述了反应吸收过程。正如 1988 年由 Chopard 和 Droz 所讨论过的那样: 上述法则并不能精确地再现上述的物理描述,但却依然保留了其主要特性。

作为气体浓度 X_A 的一个函数,便可预见晶体表面的不同稳定态。如果 X_A 比较大,则其表面在经历一段时间后将完全被 A 原子所覆盖;而原先被吸收的一小部分 B 原子将

数的可达浓度将作连续变化。

我们发现这个模型的精确解与平均场近似解是很不相同的。由于所期望的是在两维

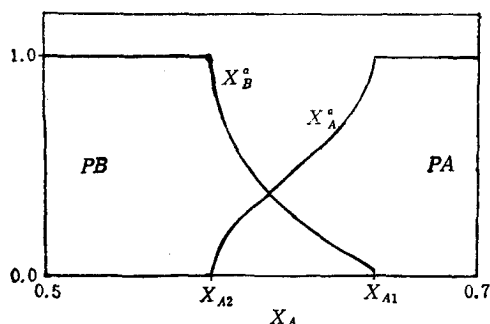


图2 由数值模拟方法求得的相图

系统中,其涨落将起到重要的作用,所以上述解的不相同就不足已为奇。这也表明要找到一种满意的分析方法来处理细胞自动机模型将是十分困难的。

我们还要确定在相变点附近 X_A^o 趋向于零或1的组分浓度。到临界点的距离分别由参数: $\varepsilon^1 = (X_{A1} - X_A)/X_{A1}$ 和 $\varepsilon^2 = (X_A - X_{A2})/X_{A2}$ 来确定。

通过在 $8 \times 10^{-4} < \varepsilon_1 < 5 \times 10^{-3}$ 区域的数据拟合,发现

$$\phi_1 \equiv X_A^o(X_{A1}) - X_A^o(X_A) \approx \varepsilon_1^{\beta_1}, \quad (11)$$

其中 $\beta_1 = 0.55 \pm 0.05$, 是序参数的稳定临界指数。

对于与序参数 ϕ_2 相联系的二阶相变,有:

$$\phi_2 \equiv X_A^o(X_A) - X_A^o(X_{A2}) \approx \varepsilon_2^{\beta_2}, \quad (12)$$

其中

$$\beta_2 = 0.45 \pm 0.05 \quad (\text{当 } 2 \times 10^{-3} < \varepsilon_2 < 10^{-2}), \quad (13)$$

尽管这些指数的确定并不很精确,但由本文所求得两个值与由 Meaking-Scalapino 用 Ziff 等人的模型所求得值是一致的^[3]。

由本文所求得的结果也可由动力学方法得到。在平衡态统计力学中,众所周知,一个开始处于非平衡态的系统按指数规律衰减而最后总要趋向于平衡态。其衰减是由弛豫时间 τ 来表征的。当趋近二阶相变时,该弛豫时间 τ 便会发散:

$$\tau \sim \varepsilon^{-\Delta}, \quad (14)$$

其中 ε 是约化温度,即到临界点的距离;而 Δ 则是动力学临界指数。

在非平衡相变中也存在着类似的情形。若采用本文的细胞自动机模型,同样也可计算非平衡动力学临界指数 Δ 。

下面将用数值方法来求解。对于 X_A 的一个固定值,计算依赖于所考虑临界点的 $X_A^o(t)$ 或 $X_B^o(t)$, 然后再将计算所得数据与如下的衰减规律进行拟合:

$$X_\alpha^o(t) = [X_\alpha^o(0) - X_\alpha^o(\infty)] \exp[-t/\tau(X_A)] + X_\alpha^o(\infty), \quad (15)$$

其中 $\alpha = A$ 或 B 。

为了降低统计误差,对由10个样品得出的数据进行平均。观察到两个不同区域的交叉区域:早期,用一个快速弛豫来表征,而经过很长时间后,将用弛豫时间 $\tau(X_A)$ 来表征。

在相变点附近,将弛豫时间与如下的规律:

$$\tau_j(X_A) \sim \varepsilon_j^{-\Delta_j} \quad (16)$$

进行拟合,其中 $j = 1, 2$ 标记两种相变。

所求得的 Δ_j 值如下:当从无序相趋近相变时,当 $9 \times 10^{-4} < \varepsilon_{1,2} < 3 \times 10^{-2}$ 时有

$$\Delta_1 = 0.98 \pm 0.08, \quad \Delta_2 = 1.03 \pm 0.10, \quad (17)$$

当从有序相趋近相变时, 发现

$$\Delta_1 = 1.02 \pm 0.15, \Delta_2 = 0.84 \pm 0.15. \quad (18)$$

对于非平衡二阶相变来说, 由本文所求得的 Δ_1 和 Δ_2 两个数值与用平均场近似所求得的值也是一致的^[4].

- [1] R. M. Ziff, E. Gulari and Y. Brashard, *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986), 2553.
- [2] B. Chopard and M. Droz, *J. Phys.*, **21** (1988), 205.
- [3] P. Meaking and D.J. Scalapino, *J. Chem. Phys.*, **87** (1987), 731.
- [4] R. Dickman, *Phys. Rev.*, **34A** (1986), 4246.

CONSTITUTION OF THE MODEL OF NONEQUILIBRIUM PHASE TRANSITION BY THE CELLULAR AUTOMATA APPROACH

LI FU-BIN

East China Institute for Theoretical Physics, Shanghai 200237

(Received 15 November 1991)

ABSTRACT

It is shown that, for a realistic problem, how to construct the Cellular Automata rules and what can be done once these rules are given. We have constituted the model of nonequilibrium phase by the Cellular Automata approach. A mean-field-like approximation is discussed and its predictions are compared with the exact numerical results for the model.

PACC: 6400; 4770; 0520