

1+1 维和 2+1 维空间上定向聚合问题的数值研究 *

王晓宏

(中国科学技术大学热科学和能源工程系, 合肥 230026)

(2000 年 8 月 22 日收到 2000 年 9 月 30 日收到修改稿)

对 1+1 和 2+1 维空间上定向聚合问题的数值模拟结果显示, 任意有限温度下的横向涨落和自由能涨落在聚合尺度 t 较大时都将趋于零温度时强耦合下的结果: $\Delta x \propto t^\nu$ 和 $\Delta F \propto t^\nu$ ($d = 1+1$ 时, $\nu = 2/3$, $\omega = 1/3$; $d = 2+1$ 时, $\nu \approx 0.6$, $\omega \approx 0.2$). 有限温度下, 由于 1+1 维和 2+1 维空间上的比热 $\hat{C}(T, t) \propto t$ 和 1+1 维空间上的熵涨落 $\Delta S \propto t^{1/2}$, 1+1 维空间上的系统能量涨落和内能涨落以及 2+1 维空间上的系统能量涨落均趋于 $t^{1/2}$ 而远强于自由能涨落. 在 2+1 维空间上, 定向聚合问题有发生相变的迹象: 当熵涨落达到其最大值时, 单位聚合尺度的熵涨落和内能涨落在聚合尺度 $t \rightarrow \infty$ 时, 可能会由低温下趋于有限值(零温度除外)转变为高温下趋于零.

关键词: 定向聚合, 表面生长现象, Kardar-Parisi-Zhang 方程

PACC: 0540, 6842, 6460

1 引言

表面生长现象广泛存在于自然界, 由于其深刻的物理和应用背景, 近年来受到很大的关注, 成为国际统计物理学研究的一个重要热点问题. 表面生长现象中具有代表性的主要有两大类: 一类是带有表面松弛的随机凝聚(random deposition with surface relaxation) 模型, 该模型可用线性随机微分方程 Edwards-Wilkinson(EW) 方程予以描述, 其动力学标度指数可以精确计算得到^[1,2]; 另一类是以 Eden 模型^[3], 弹射凝聚(ballistic deposition) 模型^[4]以及 solid-on-solid(SOS) 模型^[5]为代表的复杂生长问题, 尽管这些模型的数学特征各有不同, 但其长时间、大尺度下的红外渐进特性完全一致, 可以用著名的 Kardar-Parisi-Zhang(KPZ) 方程予以描述^[2,6,7]. KPZ 方程为非线性随机微分方程, 在 1+1 维空间, 用动力学重正化群方法进行分析, 可以精确计算动力学标度指数^[7]. 在 2+1 维空间上, KPZ 方程的性质很复杂, 由于没有稳定的不动点, 不能再利用动力学重正化群方法进行分析^[2], Schwartz 和 Edwards^[8] 利用 Edwards 六十年代成功计算湍流 Kolmogrov 常数的方法, 对关联函数进行自洽展开, 计算得到 KPZ 方程在 2+1 维空间上与数值模拟相一致的标度指数.

在 3+1 维空间上, 理论分析和数值模拟均显示 KPZ 方程将存在相变^[9-12]. 当非线性作用低于某临界值时, 在长时间和大尺度下, 非线性作用将会趋于消失, 此时 KPZ 方程呈弱耦合性, 其红外渐进特性将与 EW 方程相等价; 反之当非线性作用高于此临界值时, KPZ 方程中的非线性项和其在 1+1 维空间上一样将逐步起主导作用, 方程呈强耦合性. 目前, 有两个重要的理论问题还没有解决, 一个是在 KPZ 方程是否存在临界维数, 在大于该临界维数的空间上, KPZ 方程中的非线性项在红外渐进下将不起作用, 方程呈弱耦合性. 对此问题有不同的观点, 有人认为存在临界维数, 该临界维数为 4+1 或其他有限值^[13,14], 有人认为不存在临界维数或临界维数为无穷大^[15,16]. 另一个是在 2+1 维临界空间上, KPZ 方程是否存在相变. 对于这个问题, 九十年代初一些研究小组的数值模拟工作显示 KPZ 方程在 2+1 维临界空间上可能存在相变, 但由于没有发现新的更可靠的证据, 该问题一直没有得到解决^[17-23].

KPZ 方程不但在表面生长现象中具有重要的意义, 它还和近年来统计物理学研究的另一类重要问题: 定向聚合(directed polymer) 问题相等价^[2,6,24]. 定向聚合问题与自旋玻璃和蛋白质的大

* 国家留学基金委以色列 Bar-Illan 大学 Kort 博士后计划, 国家自然科学基金(批准号: 10002019), 教育部留学回国人员科研启动基金, 中国科学技术大学青年基金(批准号: KB1323), 以及中国科学技术大学留学回国人员基金(批准号: KB1323 和 KB1324) 资助的课题.

分子结构等问题密切相关^[2 6 25 26]。另外, Bolle 等^[27]还发现在 1+1 维空间上,定向聚合问题这一抽象的理论模型可以用高温超导实验进行研究。对于定向聚合问题,人们已进行过大量的理论和数值研究,但主要集中在对定向聚合的横向涨落(transverse fluctuation)和自由能涨落物理性质的研究上^[10 28-30]。对有限温度下的能量涨落并未给予深入的研究。本文将对 1+1 和 2+1 维空间上的定向聚合问题进行系统的数值模拟,研究各物理量涨落量的物理性质,特别是能量涨落和熵涨落。本文的数值模拟结果显示 1+1 维空间上的系综能量涨落(ΔE_B) 和内能涨落(ΔE_T) 这两种能量涨落以及 2+1 维空间上的系综能量涨落均强于自由能涨落。另外, 我们惊奇地发现在 2+1 维空间上熵涨落在达到其最大值处可能出现相变, 亦即在 2+1 维临界空间上, 相变不是发生在人们所通常研究的横向涨落或自由能涨落上, 而可能发生在熵涨落和内能涨落上, 并且在该相变的临界点上熵涨落达到最大值。

2 数学模型

我们考虑如图 1 所示的金字塔形网格上的定向聚合问题, 横向为空间坐标 x , 纵向为时间坐标(聚合尺度) t , 在网格的每一 t 层到 $t+1$ 层连接边($x-1, t$ 到 $x, t+1$ 和 x, t 到 $x+1, t+1$) 上赋予一随机能量 ϵ , 每个边上的随机能量均相互独立, 从坐标 $(0, 0)$ 到 (x, t) 有很多路径, 其中各路径中的每一步只能向下(时间正向)。对此定向聚合问题, 我们可以定义配分函数 $G(x, t) = \sum_C e^{-E_C/T}$ 其中 E_C 为从 $(0, 0)$ 到 (x, t) 的某一路径 C 上的能量之和, T 为温度(由于定向聚合问题是一个经理论抽象后得到的数学模型, 故本文中的所有物理量均为无量纲量), 由此定义得到如下的迭代关系式:

$$G(x, t+1) = G(x-1, t) e^{-\epsilon_l/T} + G(x+1, t) e^{-\epsilon_r/T}, \quad (1)$$

其中 ϵ_l 和 ϵ_r 分别为 $(x-1, t)$ 到 $(x, t+1)$ 和 $(x+1, t)$ 到 $(x, t+1)$ 连接边上的随机能量, 那么总体配分函数为 $G(t) = \sum_x G(x, t)$ 。该配分函数是定义在一个构型(configuration)上的, 我们若重新赋予各边上的随机能量, 会得到新构型上的配分函数, 亦即配分函数 $G(x, t)$ 或 $G(t)$ 为随机函数。每一个构型上的横向位移方差定义为 $x^2 \equiv \sum_x x^2 (G(x, t) /$

$G(t))$ 对所有构型进行平均, 即得到定向聚合的横向涨落 $\Delta x = (\overline{x^2})^{1/2}$ (\overline{A} 表示对所有构型上物理量 A 的系综平均)。有了配分函数之后, 也可以定义各热力学函数, 如自由能 $F(t) = -T \ln G(t)$, 其涨落为 $\Delta F = (\overline{F^2} - \overline{F}^2)^{1/2}$ 。为了克服直接利用关系式(1)进行迭代计算会导致发散这一问题, 我们对每一迭代计算时间步各空间点上配分函数 $G(x, t)$ 进行归一化处理。定义 $\hat{G}(x, t) = G(x, t) / G(t)$ 及

$$\tilde{G}(x, t+1) = \hat{G}(x-1, t) e^{-\epsilon_l/T} + \hat{G}(x+1, t) e^{-\epsilon_r/T}, \quad (2)$$

由迭代关系式(1)可得

$$\hat{G}(x, t+1) = \tilde{G}(x, t+1) \sum_x \tilde{G}(x, t+1) \quad (3)$$

及

$$\ln G(x, t+1) = \ln \tilde{G}(x, t+1) + \sum_{\tau=2}^t \ln \left(\sum_x \tilde{G}(x, \tau) \right). \quad (4)$$

由方程(2)–(4), 利用初始条件 $G(x, 0) = \delta_{x, 0}$ (在 $x=0$ 处取 1, 其他地方均等于 0), 可以迭代计算得到时间 t 步时各空间点 x 上的配分函数 $G(x, t)$, 这样也就可以计算定向聚合问题在有限温度下的横向涨落和自由能涨落。

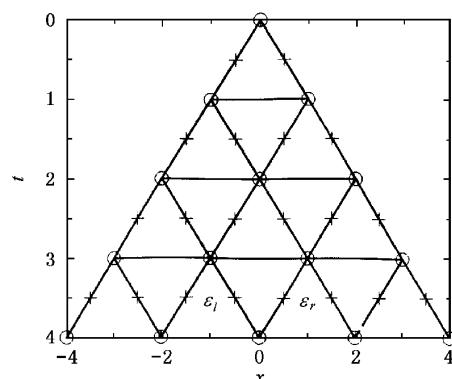


图 1 1+1 维空间上定向聚合问题示意图 “+” 表示在从上一层到下一层连接边上赋予的随机能量 ϵ

对横向涨落和自由能涨落, 已有过很多的理论和数值研究, 本文将着重研究定向聚合的能量涨落。能量涨落有两种定义: 系综能量涨落和内能涨落。系综能量涨落为 $(\Delta E)_B = (\overline{E^2} - \overline{E}^2)^{1/2}$, 其中 E 为内能,

$$E = \frac{\sum_x \sum_C E_C e^{-E_C/T}}{\sum_x \sum_C e^{-E_C/T}} = T^2 \frac{\partial \ln G}{\partial T}, \quad (5)$$

$$E^2 = \frac{\sum_{x} \sum_{C} E_C^2 e^{-E_C/T}}{\sum_{x} \sum_{C} e^{-E_C/T}} = T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial \ln G}{\partial T} \right) + \left(T^2 \frac{\partial \ln G}{\partial T} \right)^2. \quad (6)$$

内能涨落为 $(\Delta E)_T = (\overline{E^2} - \overline{E}^2)^{1/2}$. 若将某一构型的所有路径中能量之和最小的路径称为该构型的最佳路径 (optimal path), 由上述定义容易知道, 零温度时两种能量涨落和自由能涨落完全相同, 为所有随机构型最佳路径上能量之和的涨落量, 这亦即过去文献中^[28 31 32]在零温度时用能量涨落取代自由能涨落的原因. 由(5)和(6)式可得到

$$(\Delta E)_B^2 = (\Delta E)_T^2 + T^2 \hat{C}(T, t), \quad (7)$$

其中 $\hat{C}(T, t) = \frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial \ln G}{\partial T} \right) = \frac{\partial}{\partial T} \overline{E}$ 为比热.

我们在数值模拟中发现除零温度这个极限点外, 在无穷高温度这个极限点上, 内能涨落与自由能涨落也完全相同. 为了弄清有限温度时内能涨落与自由能涨落之间的差别, 我们引进熵 $S = (E - F)/T$, 熵的涨落为 $\Delta S = (\overline{S^2} - \overline{S}^2)^{1/2}$, 容易得到

$$\begin{aligned} \hat{E}(x, t+1) &= \sum_{\alpha(x, t+1)} E_{\alpha(x, t+1)} e^{-E_{\alpha(x, t+1)}/T} / G(t+1) \\ &= \left[\sum_{\alpha(x-1, t)} (E_{\alpha(x-1, t)} + \epsilon_l) e^{-(E_{\alpha(x-1, t)} + \epsilon_l) \gamma T} + \sum_{\alpha(x+1, t)} (E_{\alpha(x+1, t)} + \epsilon_r) e^{-(E_{\alpha(x+1, t)} + \epsilon_r) \gamma T} \right] / G(t+1) \\ &= [e^{-\epsilon_l/T} \hat{E}(x-1, t) + e^{-\epsilon_r/T} \hat{E}(x+1, t) + \epsilon_l e^{-\epsilon_l/T} G(x-1, t) + \epsilon_r e^{-\epsilon_r/T} G(x+1, t)] / G(t+1) \\ &= [e^{-\epsilon_l/T} \hat{E}(x-1, t) + e^{-\epsilon_r/T} \hat{E}(x+1, t) + \epsilon_l e^{-\epsilon_l/T} \hat{E}(x-1, t) + \epsilon_r e^{-\epsilon_r/T} \hat{E}(x+1, t)] / \sum_x \widetilde{G}(x, t+1), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}^2(x, t+1) &= \sum_{\alpha(x, t+1)} E_{\alpha(x, t+1)}^2 e^{-E_{\alpha(x, t+1)}/T} / G(t+1) \\ &= \left[\sum_{\alpha(x-1, t)} (E_{\alpha(x-1, t)} + \epsilon_l)^2 e^{-(E_{\alpha(x-1, t)} + \epsilon_l) \gamma T} + \sum_{\alpha(x+1, t)} (E_{\alpha(x+1, t)} + \epsilon_r)^2 e^{-(E_{\alpha(x+1, t)} + \epsilon_r) \gamma T} \right] / G(t+1) \\ &= [e^{-\epsilon_l/T} \hat{E}^2(x-1, t) + e^{-\epsilon_r/T} \hat{E}^2(x+1, t) + 2\epsilon_l e^{-\epsilon_l/T} \hat{E}(x-1, t) + 2\epsilon_r e^{-\epsilon_r/T} \hat{E}(x+1, t) \\ &\quad + \epsilon_l^2 e^{-\epsilon_l/T} \hat{G}(x-1, t) + \epsilon_r^2 e^{-\epsilon_r/T} \hat{G}(x+1, t)] / \sum_x \widetilde{G}(x, t+1). \end{aligned} \quad (12)$$

这样我们就可以利用初始条件 $\hat{E}(x, 0) = 0$ 和 $\hat{E}^2(x, 0) = 0$ 以及迭代关系式(11)和(12)计算函数 $\hat{E}(x, t)$ 和 $\hat{E}^2(x, t)$, 由此计算每个给定构型上的物理量如: E^2 , E 和 S 等. 对很多不同随机构型上的计算结果求统计平均, 即得到该物理量的涨落量. 比热可以由方程(7)得到. 迭代关系式(2)–(4),

$$(\Delta S)^2 = \frac{1}{T^2} [(\Delta E)_T^2 + (\Delta F)^2] - \frac{2}{T^2} B(T, t), \quad (8)$$

其中 $B(T, t) = \overline{E F} - \overline{E} \overline{F} = -\frac{1}{2} T^3 \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{(\Delta F)^2}{T^2} \right]$.

为了减小计算工作量, 同样可以建立迭代关系式, 用以计算各构型上的 E^2 , 内能 E 以及熵 S . 我们定义

$$\hat{E}(x, t) = \frac{\sum_{\alpha(x, t)} E_{\alpha(x, t)} e^{-E_{\alpha(x, t)}/T}}{G(t)}, \quad (9)$$

$$\hat{E}^2(x, t) = \frac{\sum_{\alpha(x, t)} E_{\alpha(x, t)}^2 e^{-E_{\alpha(x, t)}/T}}{G(t)}, \quad (10)$$

其中 $\alpha(x, t)$ 为从点 $(0, 0)$ 到点 (x, t) 的路径, 由(9)和(10)式可得到 $E = \sum_x \hat{E}(x, t)$ 和 $E^2 = \sum_x \hat{E}^2(x, t)$. 关于函数 $\hat{E}(x, t)$ 和 $\hat{E}^2(x, t)$ 的迭代关系式如下:

(11)和(12)是对应于 1+1 维空间的, 不难将其推广到 2+1 维空间.

本文对 1+1 维空间和 2+1 维空间分别选取计算时间长度(聚合尺度) $t = 2000$ 和 $t = 150$, 利用 6000 个不同随机构型的计算结果进行系统平均. 为了检验计算结果, 本文还将利用近似方法将 2+1 维空间上的计算时间长度增至 $t = 1000$. 定向聚合金

字塔型网格连接边上所赋予的相互独立的随机能量 ϵ 为 $(-0.5, 0.5)$ 之间的均匀分布随机数, 本文的数值模拟采用 Press 和 Teukolsky 给出的随机数产生程序 RAN2^[33].

3 计算结果与讨论

当温度 $T \rightarrow \infty$ 时, 定向聚合问题将退化为无规行走. 横向涨落 $\Delta x \propto t^{1/2}$, $t = N$ 时的系统能量涨落 $(\Delta E)_B$ 为 N 个相互独立的随机数之和的均方差, 亦即 $(\Delta E)_B \propto t^{1/2}$; 自由能涨落可用描述线性表面生长的 Edwards-Wilkinson 方程予以刻画: $d = 1 + 1$ 时 $\Delta F \propto t^{1/4}$, $d = 2 + 1$ 时 $\Delta F \propto (\ln t)^{1/2}$.

当温度 $T \rightarrow 0$ 时, 横向涨落 $\Delta x \propto t^\nu$ ($d = 1 + 1$ 时 $\nu = 2/3$, $d = 2 + 1$ 时 $\nu \approx 0.6$), 自由能涨落 $\Delta F \propto t^\omega$ ($d = 1 + 1$ 时 $\omega = 1/3$, $d = 2 + 1$ 时 $\omega \approx 0.2$), 该结果与以前的理论分析和数值模拟结果相一

致^[7, 8, 28-32]. 零温度时的能量涨落和自由能涨落完全相同.

有限温度时, $1+1$ 维空间上的横向涨落 Δx 和自由能涨落 ΔF 分别由 $t^{1/2}$ 趋于 $t^{2/3}$ 和由 $t^{1/4}$ 趋于 $t^{1/3}$. 对于 $T > 0.25$, 有如下标度关系: $\Delta x = T^2 f_1 \cdot (T^{-4} t)$ 和 $\Delta F = T g_1(T^{-4} t)$ (见图 2), 这与 Amar 和 Family^[34] 的理论分析的结果相一致. 在 $2+1$ 维空间, 有限温度时的横向涨落 Δx 和自由能涨落 ΔF 分别由 $t^{1/2}$ 趋于 $t^{0.6}$ 和由 $(\ln t)^{1/2}$ 趋于 $t^{0.2}$. 图 3(a) 和 3(b) 显示当 $T > 0.1$ 和 $T > 0.2$ 时分别有标度关系 $\Delta x = T f_2(T^{-2} t)$ 和 $\Delta F = T g_2(T^{-2} \ln(1 + 20t))$, 自由能涨落由弱耦合向强耦合转变的转换时间 t_x : $\ln t_x \sim T^2$, 这正是 Tang 等^[30] 利用场论方法得到的理论分析结果. 这样在 $1+1$ 维和 $2+1$ 维空间上, 横向涨落和自由能涨落均没有相变, 聚合尺度较小时呈 EW 弱耦合性质, 随着聚合尺度的增加, 将向 KPZ 强耦合性质转变.

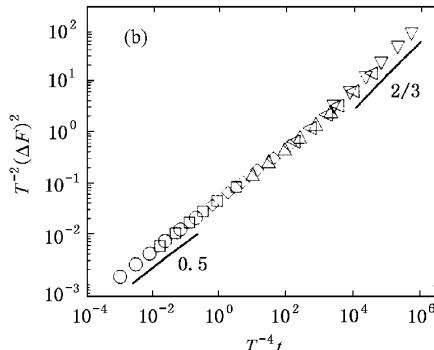
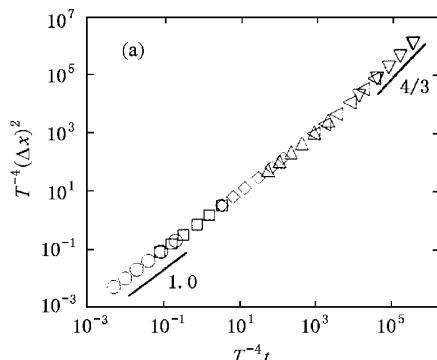


图 2 (a) $1+1$ 维空间上的横向涨落 $(\Delta x)^2$ 和 (b) $1+1$ 维空间上的自由能涨落 $(\Delta F)^2$ 标度关系曲线
“○”, “□”, “◇”, “△”, “△”和“▽”分别对应于温度 $T = 10, 5, 2, 1, 0.5, 0.25$

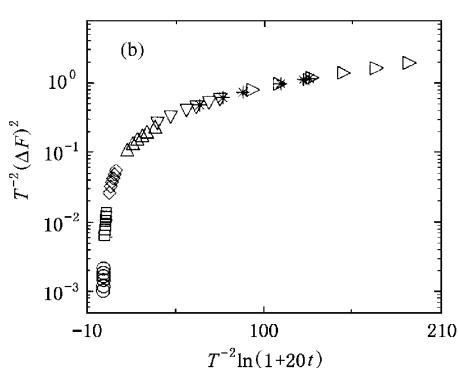
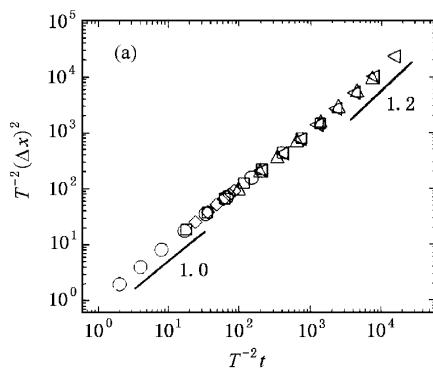


图 3 (a) 为 $2+1$ 维空间上的横向涨落 $(\Delta x)^2$ 标度关系曲线 其中“○”, “□”, “◇”, “△”和“△”分别对应于温度 $T = 1, \frac{1}{3}, \frac{1}{5}, \frac{1}{7}, \frac{1}{10}$ (b) 为 $2+1$ 维空间上的自由能涨落 $(\Delta F)^2$ 标度关系图 其中“○”, “□”, “◇”, “△”, “△”, “▽”, “*”和“△”分别对应于温度 $T = 5, 2, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5}$

对于比热 $\hat{C}(T, t)$ 数值模拟结果显示在 1+1 维和 2+1 维空间上均有 $\hat{C}(T, t) \propto t$; 当 $T \rightarrow 0$ 时, $\hat{C}(T, t) \propto T^\alpha$ ($d=1+1$ 时 $\alpha \approx 1.3$, $d=2+1$ 时 $\alpha \approx 1.6$); $T \rightarrow \infty$ 时, $\hat{C}(T, t) \propto t^{-\sigma^2/T^2}$, 其中 σ 为 $(-0.5, 0.5)$ 之间均匀分布随机数的均方差(见图

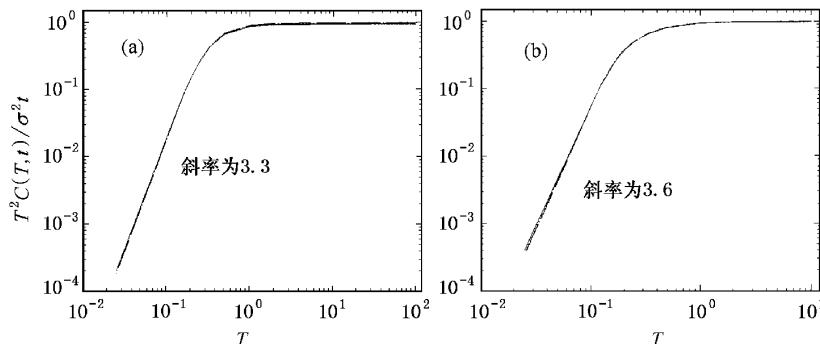


图 4 不同聚合尺度 t 时的比热随温度 T 的变化曲线 (a) 为 $d=1+1, t=100, 500, 1000, 2000$ (b) 为 $d=2+1, t=50, 100, 120, 150$

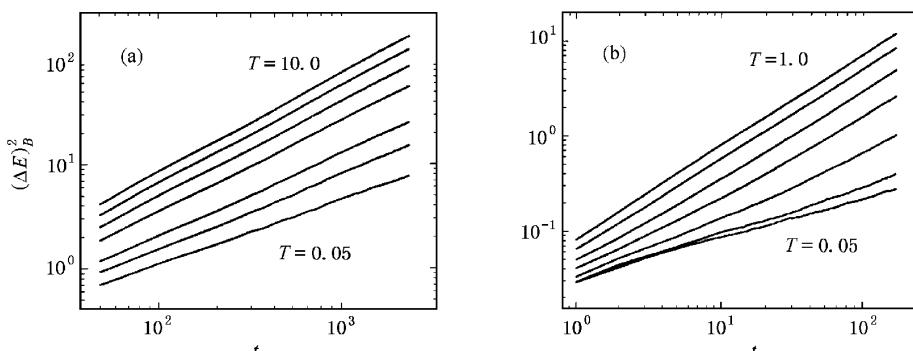


图 5 不同温度 T 时, 系统能量涨落 $(\Delta E)_B^2$ 随聚合尺度 t 的变化曲线 (a) 为 $d=1+1, T=10, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{6}, \frac{1}{8}, \frac{1}{20}$ (从上到下) (b) 为 $d=2+1, T=1, \frac{1}{3}, \frac{1}{5}, \frac{1}{7}, \frac{1}{10}, \frac{1}{15}, \frac{1}{20}$ (从上到下)

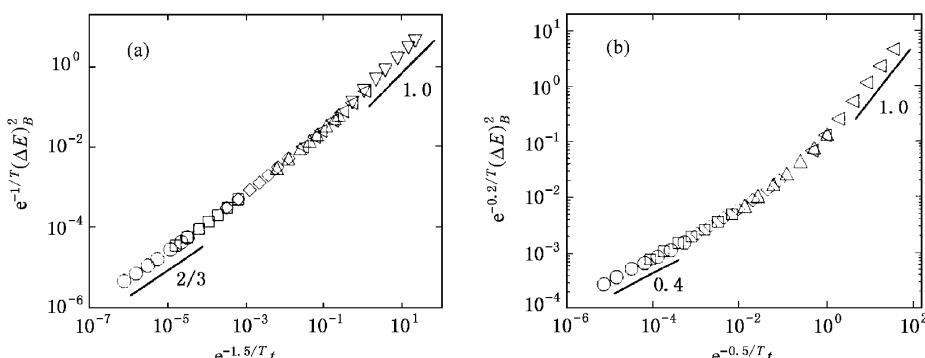


图 6 系统能量涨落 $(\Delta E)_B^2$ 标度关系曲线 (a) 为 $d=1+1$, 其中 “○”, “□”, “◇”, “△”, “△” 和 “▽” 分别对应于温度 $T=\frac{1}{12}, \frac{1}{10}, \frac{1}{8}, \frac{1}{6}, \frac{1}{5}, \frac{1}{3}$ (b) 为 $d=2+1$, 其中 “○”, “□”, “◇”, “△”, “△” 和 “▽” 分别对应于温度 $T=\frac{1}{25}, \frac{1}{20}, \frac{1}{15}, \frac{1}{10}, \frac{1}{3}$

4). 由比热的该特性可知, 除零温度外 1+1 和 2+1 维空间上的系统能量涨落在聚合尺度 t 较长时有 $(\Delta E)_B \propto t^{1/2}$ (见图 5). 对于 $T \leq 1/3$, 在 1+1 空间上有标度关系 $(\Delta E)_B = e^{1/2 T} h_1(e^{-1.5/T} t)$; 在 2+1 维空间上 $(\Delta E)_B = e^{0.1/T} h_2(e^{-0.5/T} t)$ (见图 6).

内能涨落 $(\Delta E)_T^2$ 较为复杂, 随温度并非单调变化(见图 7), 但我们可以研究熵涨落来了解它的性质。数值模拟结果显示有限温度时 $1+1$ 维空间上的熵涨落有 $\Delta S \propto t^{1/2}$ (见图 8), 这与 Fisher 和 Huse^[35]的早期讨论结果相符。熵涨落在 $T = T_P =$

0.2 处达到最大值, 并有 $T \rightarrow \infty$ 时 $(\Delta S)^2/t \sim T^{-4}$ 和 $T \rightarrow 0$ 时 $(\Delta S)^2/t \sim T$ (见图 9(a))。熵涨落在零和无穷高温度时均趋于零, 此时的内能涨落和自由能涨落完全相同。有限温度时, 由方程(8)可知 $1+1$ 维空间上的内能涨落在长聚合尺度时有 $(\Delta E)_T^2 \propto t^{1/2}$ 。

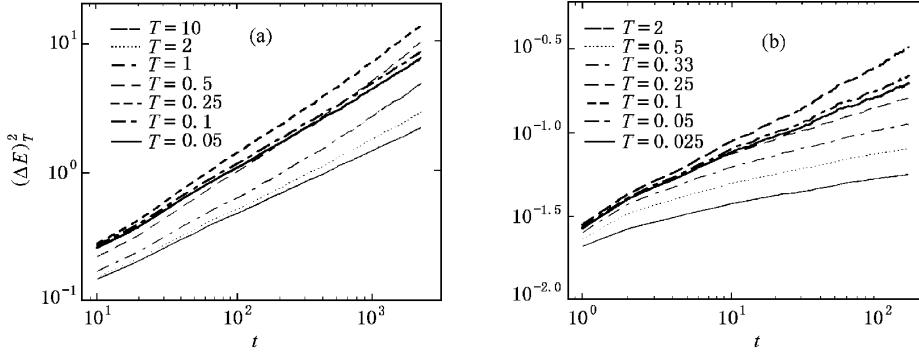


图 7 不同温度 T 时, 内能涨落 $(\Delta E)_T^2$ 随聚合尺度 t 的变化曲线 (a) 为 $d=1+1$ (b) 为 $d=2+1$

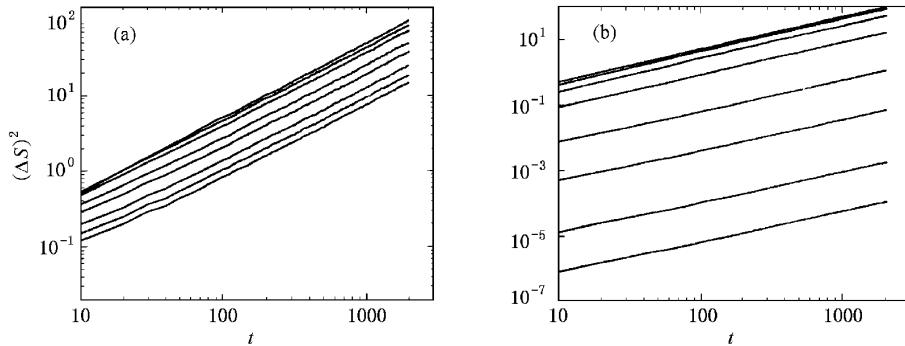


图 8 不同温度 T 时, 在 $1+1$ 维空间上熵涨落 $(\Delta S)^2$ 随聚合尺度 t 的变化曲线 (a) 为 $T = \frac{1}{5}, \frac{1}{8}, \frac{1}{15}, \frac{1}{20}, \frac{1}{30}, \frac{1}{40}, \frac{1}{50}$ (从上到下) (b) 为 $T = 10, 5, 2, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5}$ (从下到上)

仔细分析计算结果, 我们发现 $2+1$ 维空间上定向聚合的熵涨落和 $1+1$ 维空间上的情况可能会有所不同。熵涨落在零和无穷高温度时均趋于零; 在 $T = T_C = 0.1075$ 处达到最大值; 当 $T < T_C$ 时, 在双对数图上熵涨落 $(\Delta S)^2$ 随时间 t 的变化斜率逐步增加而趋于 1(见图 10(a)), 亦即此时熵涨落 $\Delta S \sim t^{1/2}$ 且有 $T \rightarrow 0$ 时 $(\Delta S)^2/t \sim T$, 这和 $1+1$ 维空间上的情况相类似; 但当 $T > T_C$ 时, 在双对数图上熵涨落 $(\Delta S)^2$ 随时间 t 的变化斜率却缓慢减小(见图 10(b)), 若这种趋势不会因为聚合尺度 t 的进一步增大而改变的话, 就会有 $t \rightarrow \infty$ 时 $(\Delta S)^2/t \rightarrow 0$ 这样的话熵涨落 ΔS 在其取最大值时的 $T = T_C$ 处将发生相变。令 $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{(\Delta S)^2}{t} = \lambda(T)$, 当 $0 < T < T_C$ 时, $\lambda(T) >$

> 0 ; 当 $T > T_C$ 时, $\lambda(T) = 0$ (见图 9(b))。我们采用下述近似计算方法将 $2+1$ 维空间上的计算时间长度增至 $t = 1000$, 对此结果进行检验。

由于定向聚合的横向涨落 $\Delta x \sim t^\nu$ ($d = 2+1$ 时 $\nu \approx 0.6$), 故当 $t' < t$ 时定向聚合的所有路径中的另一端点 $x(t')$ 落入区域 $|x(t')| > ct^\nu$ (c 为量阶为 1 的常数) 的概率很小且随其端点的横向偏移 $|x(t')|$ 的增大呈指数衰减, 这样在对定向聚合问题进行数值模拟时可以在横向加上一个限制 $|x(t')| < ct^\nu$ 近似取代原定向聚合问题。我们数值模拟聚合尺度为 $t = 1000$ 的定向聚合问题时, 用计算区域 $1000 \times 80 \times 80$ 取代 $1000 \times 1000 \times 1000$, 使得计算量大为减小。我们用此近似方法计算得到的 $2+1$ 维空间上熵

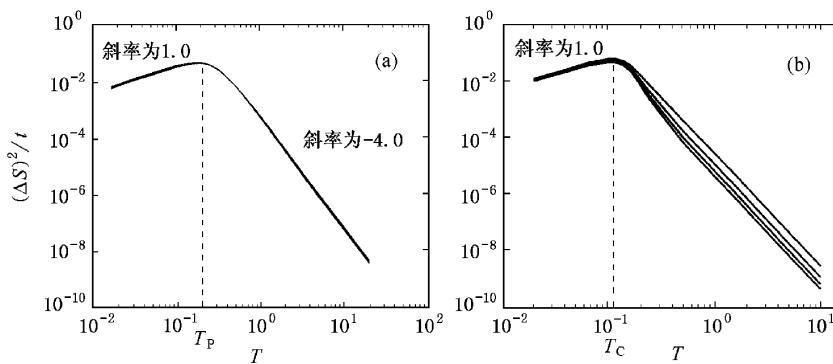


图 9 单位聚合长度下的熵涨落 $(\Delta S)^2/t$ 在不同聚合尺度 ξ 下随温度 T 的变化曲线 (a) 为 $d=1+1, \xi=50, 500, 1000, 2000$ (b) 为 $d=2+1, \xi=100, 300, 600, 1000$ (从上到下)

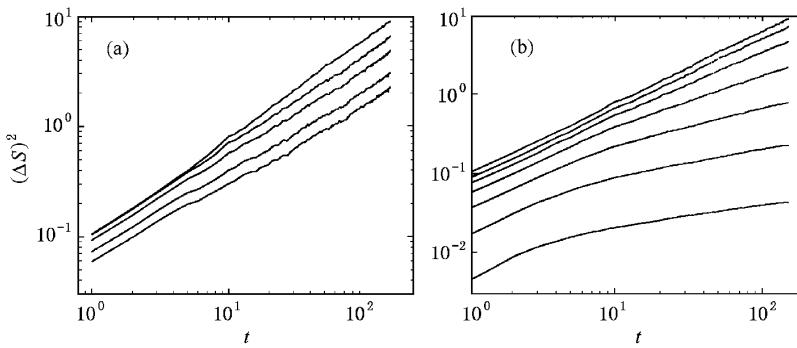


图 10 不同温度 T 时, 在 2+1 维空间上熵涨落 $(\Delta S)^2$ 随聚合长度 t 的变化曲线 (a) 为 $T=\frac{1}{9}, \frac{1}{3}, \frac{1}{20}, \frac{1}{30}, \frac{1}{40}, \frac{1}{50}$ (从上到下) (b) 为 $T=\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5}, \frac{1}{6}, \frac{1}{7}, \frac{1}{9}, \frac{1}{3}$ (从下到上)

涨落的计算结果与计算时间长度为 $t=150$ 时没有作出近似时的结果相类似, 出现相变迹象(见图 9(b)).

由方程(8)可得, 当 $T < T_c$ 时, 2+1 维空间上的内能涨落有 $(\Delta E)_T \propto t^{1/2}$. 但 $T > T_c$ 时, 内能涨落可能会有 $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{(\Delta E)_T^2}{t} = 0$, 亦即 2+1 维空间上内能涨落在熵涨落达到最大值时也将可能发生相变: 令 $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{(\Delta E)_T^2}{t} = \gamma(T)$, 当 $0 < T < T_c$ 时, $\gamma(T) > 0$; 当 $T > T_c$ 时, $\gamma(T) = 0$.

4 结 论

本文对 1+1 和 2+1 维空间上的定向聚合问题进行了系统的数值模拟, 对并未给予足够关注的定向聚合的能量涨落进行了深入的研究. 本文的数值模拟结果表明在 1+1 和 2+1 维空间上横向涨落及

自由能涨落均没有相变, 在任意温度下将趋于零. 温度时强耦合下的结果. 而能量涨落则较为复杂, 在有限温度下可以定义两种能量涨落: 一种为系综能量涨落 $(\Delta E)_B$; 另一种为内能涨落 $(\Delta E)_T$. 这两种能量涨落之间的差别可以用比热予以刻画. 为了弄清内能涨落的物理性质, 我们引进熵这一物理量, 并研究其涨落特性. 在零温度和无穷高温度这两种极限情况下, 由于比热和熵涨落均趋于零, 这两种能量涨落和自由能涨落将会完全相同. 在有限温度下, 在 1+1 和 2+1 维空间上, 聚合尺度(时间) t 较大时, 由比热 $\tilde{\chi}(T, t) \propto t$ 可以推得系综能量涨落 $(\Delta E)_B \propto t^{1/2}$. 在 1+1 维空间上任意有限温度下熵涨落 $\Delta S \propto t^{1/2}$, 故可得内能涨落 $(\Delta E)_T \propto t^{1/2}$, 亦即 1+1 维空间上这两种能量涨落以及 2+1 维空间上的系综能量涨落均远大于自由能涨落. 另外, 数值模拟结果显示 2+1 维空间上熵涨落的物理性质可能较为复杂, 在 2+1 维空间上熵涨落在其达到最大值处可能发生相变. 若此结论是正确的话, 那么内能涨落在熵

涨落达到其最大值时也将发生相变,只在低于该临界温度时(除零温度外)才有(ΔE)_T $\propto t^{1/2}$. 该结论有待于今后进一步研究工作的检验.

作者感谢 Bar-Illan 大学的 Shlomo Havlin 教授和 Tel-Aviv 大学的 Moshe Schwartz 教授给予的悉心指导和鼓励.

- [1] S. F. Edwards, D. R. Wilkinson, *Proc. Roy. Soc. London*, **A381** (1982), 17.
- [2] A. L. Barabási, H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [3] M. Eden, in *Proceedings of the Fourth Berkley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Volume IV: Biology and Problems of Health, edited by J. Neyman (University of California Press, Berkley, 1961), pp. 223–239.
- [4] M. J. Vold, *J. Coll. Sci.*, **14** (1959), 168.
- [5] J. M. Kim, J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.*, **62** (1989), 2289.
- [6] T. Halpin-Healy, Y. C. Zhang, *Phys. Rep.*, **254** (1995), 215.
- [7] M. Kardar, G. Parisi, Y. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986), 889.
- [8] M. Schwartz, S. F. Edwards, *Europhys. Lett.*, **20** (1992), 301; *Phys. Rev.*, **E57** (1998), 5730.
- [9] K. Moser, J. Kertész, D. E. Wolf, *Physica*, **A178** (1991), 217.
- [10] J. Kim, A. J. Bray, M. A. Moore, *Phys. Rev.*, **A44** (1991), R4782.
- [11] D. Forster, D. R. Nelson, M. J. Stephen, *Phys. Rev.*, **A16** (1977), 732.
- [12] E. Medina, T. Hwa, M. Kardar, Y. C. Zhang, *Phys. Rev.*, **A39** (1989), 3053.
- [13] J. P. Bouchaud, M. E. Cates, *Phys. Rev.*, **E47** (1993), R1455.
- [14] M. Lässig, H. Kinzelbach, *Phys. Rev. Lett.*, **78** (1997), 903.
- [15] T. Ala-Nissila, *Phys. Rev. Lett.*, **80** (1998), 887.
- [16] J. M. Kim, *Phys. Rev. Lett.*, **80** (1998), 888; *Physica*, **A270** (1999), 335.
- [17] B. Derrida, O. Golinelli, *Phys. Rev.*, **A41** (1990), 4160.
- [18] H. Guo, B. Grossmann, M. Grant, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 1262.
- [19] Y. P. Pellegrini, R. Jullien, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 1745.
- [20] H. Yan, D. Kessler, L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 926; **68** (1992), 1249.
- [21] J. G. Amar, F. Family, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 534; *Phys. Rev.*, **A41** (1990), 3399.
- [22] P. Meakin, *Phys. Rep.*, **235** (1993), 189.
- [23] J. Kertész, T. Vicsek, in *Fractal in Science*, edited by A. Bunde, S. Havlin (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [24] M. Kardar, Y. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **58** (1987), 2087.
- [25] B. Derrida, H. Spohn, *J. Stat. Phys.*, **51** (1988), 817.
- [26] A. Ansari *et al.*, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **82** (1985), 5000.
- [27] C. A. Bolle *et al.*, *Nature*, **399** (1999), 43.
- [28] J. Kim, M. A. Moore, A. J. Bray, *Phys. Rev.*, **A44** (1991), 2345.
- [29] J. Krug, P. Meakin, T. Halpin-Healy, *Phys. Rev.*, **A45** (1992), 638.
- [30] L. H. Tang, T. Nattermann, B. M. Forrest, *Phys. Rev. Lett.*, **65** (1990), 2422.
- [31] D. A. Huse, C. L. Henley, *Phys. Rev. Lett.*, **54** (1985), 2708.
- [32] N. Schwartz, A. Nazaryev, S. Havlin, *Phys. Rev.*, **58** (1998), 7642.
- [33] W. H. Press, S. A. Teukolsky, *Computers in Physics*, **6** (1992), 522.
- [34] J. G. Amar, F. Family, *Phys. Rev.*, **A45** (1992), 5378.
- [35] D. S. Fisher, D. A. Huse, *Phys. Rev.*, **B43** (1991), 10728.

NUMERICAL SIMULATIONS FOR DIRECTED POLYMERS IN 1 + 1 AND 2 + 1 DIMENSIONS^{*}

WANG XIAO-HONG

(Department of Thermal Science and Energy Engineering , University of Science and Technology of China , Hefei 230026 , China)

(Received 22 August 2000 ; revised manuscript received 30 September 2000)

ABSTRACT

Numerical Simulations for directed polymers in 1 + 1 and 2 + 1 dimensions show that the transverse fluctuations and free energy fluctuations tend to the strong coupling limit : $\Delta x \propto t^\nu$, $\Delta F \propto t^\omega$ ($\nu = 2/3$, $\omega = 1/3$ for $d = 1 + 1$; $\nu \approx 0.6$, $\omega \approx 0.2$ for $d = 2 + 1$) at any finite temperature as their behaviors at zero temperature for the long length t of polymer. At finite temperatures , as a result of that the specific heat in both 1 + 1 dimensions and 2 + 1 dimensions scales as t and the entropy fluctuations in 1 + 1 dimensions scale as $t^{1/2}$, the ensemble energy fluctuations in both 1 + 1 and 2 + 1 dimensions and the internal energy fluctuations in 1 + 1 dimensions are more pronounced than the free energy fluctuations and scale as $t^{1/2}$. There is an indication of a phase transition in 2 + 1 dimensions. It is plausible that the entropy fluctuations and the internal fluctuations per unit length polymers for $t \rightarrow \infty$ will become zero value at high temperatures from nonzero values at low temperatures at some temperature $T = T_C$ where the entropy fluctuation reaches maximum.

Keywords : directed polymers , surface growth phenomena , KPZ equation

PACC : 0540 , 6842 , 6460

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10002019) , and by the Scientific Research Foundation for Returned Scholars of State Education Ministry of China , and by the Foundation of University of Science and Technology of China for Young Scholars (Grant Nos. KB1323 and KB1324).