李-杨相变理论在 2-urn 模型中的应用

刘小贤

(南京师范大学物理科学与技术学院,210097,江苏,南京)

[摘要] 讨论了李-杨相变理论在沙粒分离的 2-urn 模型非平衡系统中的应用. 虽不能得到配分函数,但能够得到一个有效配分函数,并把它写成一个有效逸度 z 的多项式,通过数值计算得到:在热力学极限下,有效配分函数的零点位于 z 复平面的单位圆上;在实际控制参数复平面中,零点会聚于模型的相变点. 进一步验证了李-杨理论在非平衡系统中的应用.

[关键词] 李-杨理论,配分函数,2-urn 模型,非平衡系统

[中图分类号] O469, [文献标识码] A, [文章编号] 1001-4616(2005)01-0046-04

Lee-Yang Theory of Phase Transitions for a 2-urn Model

Liu Xiaoxian

(School of Physical Science and Technology, Nanjing Normal University, 210097, Nanjing, China)

Abstract: Lee-Yang theory of phase transitions is applied to a 2-urn model for the separation of sand. Although one does not have a partition function, he obtains an effective partition function of this nonequilibrium system, and can express it as a polynomial of the effective fugacity z. Numerical calculations show that in the thermodynamic limit the zeros of the effective partition function are located on the unit circle in the complex z plane. In the complex plane of the actual control parameter, certain roots converge to the transition point of the model. Thus, it further proves the application of Lee-Yang theory in nonequilibrium systems.

Key words: Lee-Yang theory, partition function, 2-urn model, nonequilibrium system

0 引言

1952 年,李-杨[1,2]提出配分函数零点相变理论,他们把外场或逸度看成复变量,研究配分函数零点在复平面中的分布,从而给研究临界现象提供了一种非常重要而有效的方法. 在平衡态相变中,我们可以通过零点在正实轴附近的分布情况来了解相变的类型:若零点分布垂直趋近正实轴则为一级相变,若零点分布以 $\pi/4$ 趋近正实轴则为二级相变. 近年来,各种系统的非平衡相变被广泛关注[3-5],人们对李-杨零点相变理论在非平衡态的相变中的应用也越来越感兴趣[6-9],其动机是想把平衡态相变的概念应用到非平衡态的相变中. 然而,在非平衡系统中,人们得不到平衡系统中的配分函数,只能找出适当的有效配分函数(EPF). 以往的文献主要讨论了两种动力学模型[8]:第一种是驱动耗散系统,这些模型中存在一个唯一的稳态,能够计算出微观状态概率分布数,并把之看成有效配分函数. 第二种是直接渗流模型,这些模型中把生存概率 $P(t)$ 看成有效配分函数.

urn 模型最早是由 Ehrenfest P 与 Ehrenfest T[10]两人提出,后来 Lipowski 等人为了展示颗粒物质体系的对称破缺现象,引入了 2-urn 模型[11],Bena I 等人[8]把李-杨零点相变理论应用到这个具有非平衡态特性的 2-urn 模型中,得到了一些有趣的结论. 然而,Lipowski 在其模型中假定了 urn 的温度 T 与粒子数成线性关系,这一点虽然在定性上和 Eggers[12]的结论相符,但不符合其定量关系,基于此,本文我们采用了 Eggers 的 $T\propto N^{-2}$的关系,得出了这样的结论:有效逸度 z 与尺度有关时李-杨零点理论同样适用. 进一步

收稿日期:2004-06-28.
作者简介:刘小贤,女,1978—,助教,主要从事凝聚态物质的教学与研究,E-mail:liuxiaoxian@njnu.edu.cn

验证了,李-杨零点相变理论能够应用到更为广泛的非平衡态相变的问题中.

1 2-urn 模型和计算方法

我们研究的系统如下:N 个颗粒分布在 A、B 两 urn 中,粒子数分别为 N_A、N_B($N_A + N_B = N$),定义颗粒的平均动能为 urn 的温度,为了模拟粒子数越大,urn 温度越低的效果,我们引用 Eggers 的 $T \propto N^{-2}$ 的结论[12],取:

$$T(n_{A,B}) = T_0 + \frac{\Delta}{n_{A,B}^2} \tag{1}$$

其中($n_{A,B} = N_{A,B}/N$)为给定 urn 的粒子数密度,T_0 和 Δ 是大于零的控制参量. 对于真实的颗粒物质体系来说,系统的温度不仅与粒子数密度相关,还需要考虑到颗粒之间的静摩擦力、粘滞力以及外界驱动类型等因素,因此在方程(1)中,T_0 表征外界驱动给予的能量,而 Δ 表征能量的耗散,我们称之为耗散系数. 然后我们假定粒子在 urn 中运动时满足 Maxwell-Bolzmann 分布,粒子分布如下:

$$p_{A,B}(z) = \frac{mgN_{A,B}}{T(N_{A,B})}\exp\left[\frac{-mgh}{T(n_{A,B})}\right] \tag{2}$$

其中 m 为单个粒子的质量,g 为重力加速度,h 为高度. 该模型的动力学过程为:

(1) 在 N 个粒子中任意取一个粒子.

(2) 被选定的粒子有 $\exp[-mgh/T(n_{A,B})]$ 的几率跳到另外一个 urn 中.

由于我们不考虑狭缝高度对系统的影响,取 $mgh = 1$,这表明我们研究的模型由参量 T_0 和 Δ 来决定.

为进一步了解系统的动力学行为以及怎样随着参数 T_0 和 Δ 的变化在不同区间内的转变,对于上述给出的 urn 模型,我们写出在 t 时刻,A 间隔中有 M 个粒子数几率 $p(M,t)$ 的演化主方程[11],方程如下:

$$p(M,t+1) = F\left(\frac{N-M+1}{N}\right)p(M-1,t) + F\left(\frac{M+1}{N}\right)p(M+1,t) + \left[1 - F\left(\frac{M}{N}\right) - F\left(\frac{N-M}{N}\right)\right]p(M,t) \quad M = 1,2,\cdots,N-1 \tag{3}$$

其中 $F(n) = n\exp\left(-\frac{1}{T(n)}\right)$,表示某一时刻从给定 urn 跳到另一 urn 粒子流的通量. Shim 等人[13] 考虑了 $t \to \infty$ 时,系统在定态时的粒子几率分布, 解析地得出:

$$p_s(M) = \frac{F\left(\frac{N-M+1}{N}\right)}{F\left(\frac{M}{N}\right)}p(M-1) = \frac{1}{Z_N}\prod_{i=1}^{M}\frac{F\left(\frac{N-i+1}{N}\right)}{F\left(\frac{i}{N}\right)} \tag{4}$$

由几率的归一化条件可得:

$$Z_N = \left[1 + \sum_{M=1}^{N}\prod_{i=1}^{M}\frac{F\left(\frac{N-i+1}{N}\right)}{F\left(\frac{i}{N}\right)}\right] \tag{5}$$

我们可以把 Z_N 看成是有效配分函数.

该模型描述了 2-urn 中粒子对称分布的相变,为了展示颗粒物质体系的对称破缺,$F(n)$ 必须满足单峰形式[8],我们选用以下 $F(n)$ 的形式:

$$F(n) = n\exp(-An^2) \tag{6}$$

用唯一的控制参数 A 表征了该问题的特性. 把(6)代入(5),通过化解可以得到:

$$Z_N = \sum_{M=0}^{N}\frac{N!}{M!(N-M)!}z^{M(N-M)} \tag{7}$$

其中 $z = \exp(-A(N+1)/N^2)$. 李-杨[1] 定义逸度 $z = (2\pi mkT/h^2)^{\frac{3}{2}}\exp(\mu/kT)$,即逸度是化学势的函数. 他们首先提出了"点阵气体",验证了有外场的伊辛模型(Ising model)与点阵气体(a lattice gas)在数学上是等价的,在铁磁体问题中起着外参量作用的变量(βH)在点阵气体中提供一个可变的逸度. 在非平衡系统中,人们得不到平衡系统中的配分函数,只能找出适当的有效配分函数和有效逸度. 在驱动耗散系统

中,常把相变率看成有效逸度,如非平衡简单排斥过程(ASEP)开放边界的问题中,把边界插入或离开的概率看成复变量.在定向渗流模型中,常把渗流概率看成复变量.文中讨论的2-urn模型非平衡相变中,z类似起着外参量的作用,把它看成复变量,称之为有效逸度,因此有效配分函数 Z_N 可写成有效逸度 z 的多项式.下面我们可以通过数值计算求解出有效配分函数 Z_N 的零点分布.

2　计算结果以及数据分析

2.1　有效逸度 z 复平面中零点的分布

由(7)式我们知道有效配分函数与 N 的值有关,且多项式的阶数随着 N 增大迅速变大,因此,我们只能计算出较为有限的 N 的有效配分函数的零点.但是,已经能够很好地看出变化趋势.

由图 1 我们得出:随着 N 的增大,有效逸度 z 零点分布趋向于单位圆.我们可以这样来理解,由(7)我们可以得到非平衡态复自由能密度 $f_N(z) = (1/N)\ln(Z_N)$,如果 N 很大,当 $|z| > 1$ 时,有效配分函数 EPS 由中间项 $M = N/2$ 决定,因此 $f_N(|z| > 1) \sim (N/4)\ln z$,我们定义:

在 $|z| > 1$ 区域里 $f_N^{(1)}(|z| > 1) = (N/4)\ln z$.

另一方面,当 $|z| < 1$ 时,EPS 只由 $M = 0$ 和 $M = N$ 决定,因此 $f_N(|z| < 1) \sim 1/N$,我们定义:

在 $|z| < 1$ 区域里 $f_N^{(2)}(|z| < 1) = 0$.

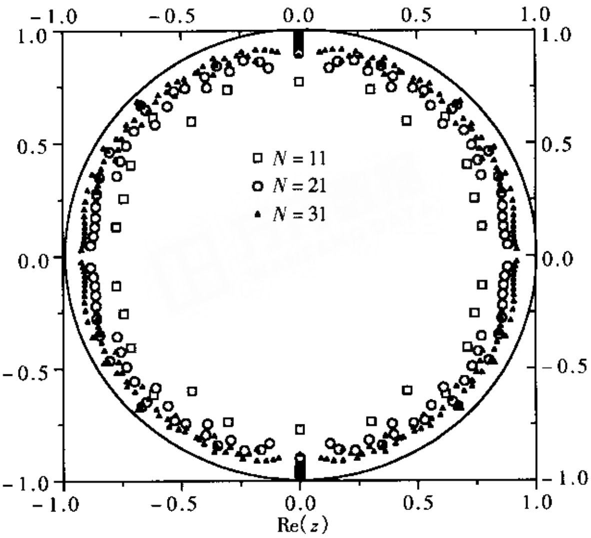

图 1　有效逸度 z 复平面中零点分布图

所以,在把 EPS 中有效逸度 z 作为控制参数的情况下,模型在 $|z| = 1$ 处发生突变.在热力学极限下 $N \to \infty$,f_N 在相变点存在一个无限的跳跃,我们由 $r = 1$ 满足 $\mathrm{Re}\, f_N^{(1)}(z) = \mathrm{Re}\, f_N^{(2)}(z)$,令 $z = re^{i\Phi}$ 找出了极限下 EPS 零点分布位置.因此,在热力学极限下,有效逸度 z 零点分布于单位圆上,这与我们数值计算结果结论一致.

2.2　实际控制参数 A 复平面中零点的分布

有效逸度 z 作为控制参数的情况下,存在一个 f_N 的跳跃相变;而若转换成实际控制参数 A,则存在一个连续相变.我们把 $z = \exp(-A(N+1)/N^2)$ 转换为 $A = -N^2/(N+1)\ln(z)$,如图2.(a)、(b)、(c)分别画出了 $N = 11$、$N = 21$、$N = 31$ 时的零点分布,(d)图画出了 $N = 31$ 时临界点 $A = 2$ 附近的零点分布,零点分布以 $\pi/4$ 趋近正实轴,结果发现与 Bena I 等人[8] 的解析结论一致.也就是说,我们可以通过李-杨相变理论找出相变的位置及类型.

3　结论

我们把李-杨零点相变理论应用到一个具有非平衡态特性的 2-urn 模型中,分别计算出了有效逸度 z 复平面中零点的分布和实际控制参数 A 复平面中零点的分布.根据零点在正实轴附近的分布情况判断出相变的位置和类型,结果发现热力学极限下 2-urn 模型在临界点 $A = 2$ 处存在二级相变.区别与其他模型[6,7] 的是,我们的模型中不仅有效逸度 z 与尺寸有关,而且采用了 Eggers 模型中的温度 T 与粒子数成二次方的关系,虽然相变出现的临界值量值上没有什么变化,但这样更加符合物理实验结论中的参量关系,使我们的结论更加具有物理意义,从而进一步验证了李-杨零点相变理论能够应用到更为广泛的非平衡态相变的问题中.

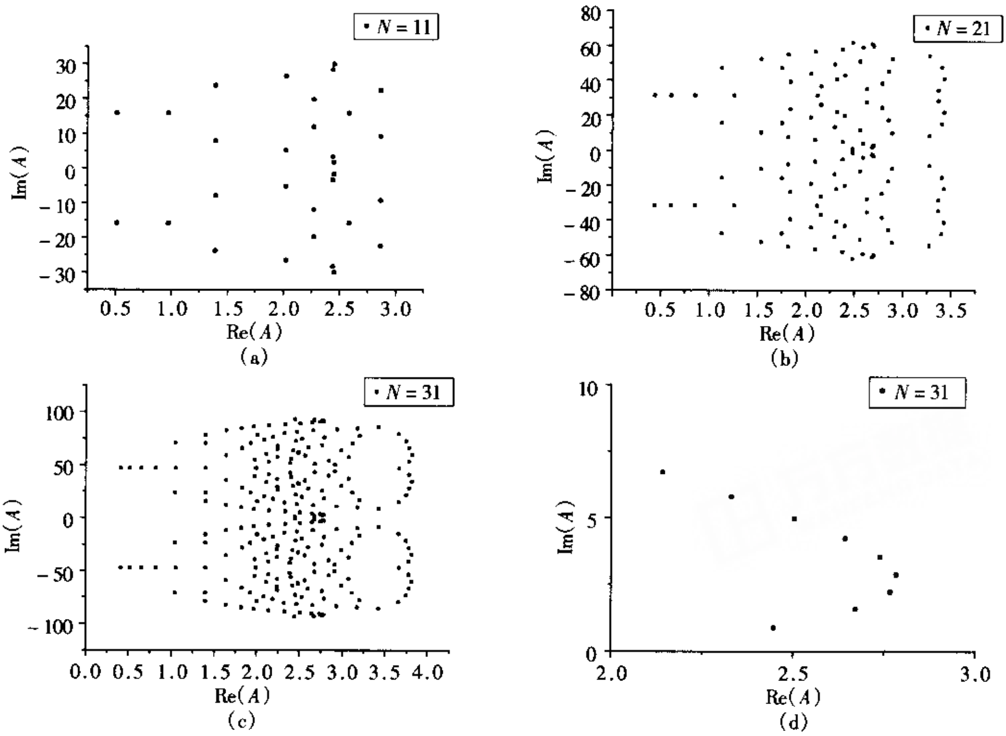

图2 实际控制参数 A 复平面中零点分布图

致谢：感谢导师童培庆教授的悉心指导！

[参考文献]

[1] Yang C N, Lee T D. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation[J]. Phys Rev,1952,87(3):404—409.

[2] Lee T D, Yang C N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model[J]. Phys Rev, 1952,87(3):410—419.

[3] Schmittmaann B, Zia R K P. Statistical Mechanics of Driven Diffusive Systems in Phase Transitions and Critical Phenomena [M]. London: Academic Press,1995.

[4] Privman V. Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension[M]. Cambridge: Cambridge University Press,1997.

[5] Mukamel D. Phase Transitions in Nonequilibrium Systems[M]. Bristol: Institute of Physics Publishing,2000

[6] Arndt P F. Yang-Lee Theory for a Nonequilibrium Phase Transition[J]. Phys Rev Lett,2000, 84(5):814—817.

[7] Blythe R A, Evans M R. Lee-Yang Zeros and Phase Transitions in Nonequilibrium Steady States[J]. Phys Rev Lett,2002, 89(8):080601—080604.

[8] Bena I, Coppex F, Droz M, *et al*. Yang-Lee Zeros for an Urn Model for the Separation of Sand[J]. Phys Rev Lett,2003,91 (16):160602—160605.

[9] Arndt P F, Dahmen S R, Hinrichsen H. Directed Percolation, Fractal Roots and the Lee-Yang Theorem[J]. Physica A, 2001,295(1):128—131

[10] Ehrenfest P, Ehrenfest T. The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics[M]. New York: Dover Press, 1990.

[11] Lipowski A, Droz M. Urn model of separation of sand[J]. Phys Rev E,2002,65(3):031307—0313314.

[12] Eggers J. Sand as Maxwell 's Demon[J]. Phys Rev Lett,1999, 83(25):5322—5325.

[13] Shim G M, Park B Y, Lee H. Analytic study of the urn model for separation of sand[J]. Phys Rev E,2003,67(1): 011301—011306.

[责任编辑:丁蓉]