

Válasz ÓDOR GÉZANAK

„Hőmérsékleti egyensúlytól távoli statisztikus fizikai rendszerek numerikus modellezése”

című MTA doktori értekezésem bírálatára

Mindenek előtt nagyon köszönöm Ódor Gézának az értekezésem alapos áttanulmányozását, és a munkámra valamint a dolgozatra adott igen pozitív értékelését. A feltett kérdéseire az alábbiakban válaszolok.

(1) A szerző numerikus szimulációval megmutatta, hogy a diffúzió-limitált aggregáció fraktál dimenziója csatorna geometriában mérési hibán belül megegyezik a nyílt sík geometriában mért értékkel. Lehetne-e itt is definiálni a kritikus átmenetek felületi skálázáshoz hasonló, geometria függő exponenseket, illetve meghatározni őket?

A felületi növekedés alapvető modelljével, az $1+1$ dimenziós Kardar-Parisi-Zhang egyenlettel kapcsolatban 6-7 évvel ezelőtt egy jelentős felfedezés született: az univerzális exponenseken (α, β, z) kívül a fluktuációk eloszlása is ismertté vált. A növekedő felület egy x pont feletti $h(x)$ magasságának az átlagos magassághoz mért $h(x) - \langle h \rangle$ különbsége egy olyan stochasztikus változó, amely kis t időkre vagy végtelen térbeli rendszerre $t^{1/3}$ szerint skálázódik. Ezen skálázás kitranszformálása után aszimptotikusan az eloszlás nem normális (Gauss) lesz, hanem az egyik Tracy-Widom eloszláshoz tart [1, 2, 3]. Érdekes módon ez az eloszlás az állapotsűrűség jellemzésére kidolgozott random mátrix elméletekből ismert GOE (Gauss-i ortogonális sokaság) eloszlás a lapos kezdeti feltétel esetén, és a GUE (Gauss-i unitér sokaság) eloszlás kör – vagy általánosan görbült – kezdeti feltétel esetén. Így a KPZ univerzalitás osztály (legalább) két alosztályra bontható a kezdeti feltétel geometriája alapján. A fenti eredményeket kísérletileg is sikerült igazolni egy nematikus folyadékkristály elektrokonvekcióval létrehozott két fázisa közötti átmenetnek a vizsgálatával [4].

A DLA esetén véleményem szerint szintén várható, hogy a radiális és a lapos (csatorna) geometria az egyező alapvető exponenseknél (mint például a fraktáldimenzió) mélyebben vizsgálva különbséget mutasson. Erre utalhat az is, hogy a diffúzió-limitált növekedés zajmentes változatában, a viszkózus ujjasodásban míg a radiális geometriában a folyamatos csúcsfelhasadás egy egyre jobban elágazó struktúrát eredményez, véges szélességű csatornában aszimptotikusan egy analitikailag is ismert alakú, stabil haladó megoldás, a Saffman-Taylor megoldás fejlődik ki.

A DLA esetén a modellek különböző volta miatt közvetlenül nem jól definiált a KPZ egyenletnél vizsgált $h(x) - \langle h \rangle$ mennyiség, de első közelítésben itt is fluktuáló mennyiségek eloszlását lenne érdemes vizsgálni. Jól definiált például a növekvő struktúra legmesszebbi pontjának $r_{\text{csúcs}}$ távolsága a magtól, amelynek átlagát kitranszformálva vélhetően egy aszimptotikus eloszlást kapnánk.

(2) A szemcsés anyagoknál megfigyelt Edwards sokaság univerzalitási osztály exponensei ismertek-e már az irodalomban, illetve milyen más erőhálózati osztályokról lehet még tudni?

A hálózatok perkoláció típusú vizsgálatával¹ a perkoláción kívül nemcsak erőhálózatokat, hanem például súlyozott Barabási-Albert hálózatokat is tanulmányoztak [5]. Ilyen értelemben az így kapott univerzalitási osztályok mind ugyanabba a családba tartoznak, amelyeket a perkoláció-típusú skálázási exponensei jellemeznek (szemben például az egyensúlyi fázisátalakulásokkal, így az Ising-moddal, vagy a felületnövekedéssel, amelyekben egész más mennyiségek a jellemzők). Ezen a családon belül az „erőhálózatokat” úgy lehetne definiálni, amelyekben a hálózat (rács) csúcspontjain valamilyen lokális kényszer van felírva.

A 11. fejezetben vizsgált rendszerekben a hálózat geometriai jellegű, így az egy csúcsba mutató kötéseknek adott az iránya; itt a kényszer a zérus vektoriális összeg, vagyis a kötések irányába mutató vektorok (amelyek abszolút értéke az adott kötéshez rendelt valós szám) összege nulla. Mint az a kritikus jelenségek dinamikájából ismert, az extra kényszerek, így egy megmaradási törvény, alapvetően befolyásolják a rendszer viselkedését (például Hohenberg és Halperin terminológiájában az kényszer nélküli A modell, szemben a megmaradó rendparaméterrel jellemzett B modellel [6]).

A vektoriális egyensúllyal jellemzett univerzalitás osztály egy lényeges tagja az Edwards sokaság. Nem tudok arról, hogy az általunk numerikusan meghatározott skálázási exponenseket mások (különösen például analitikusan) meghatározták volna. Itt jegyezném meg, ahogy Kun Ferenc (3)-as kérdésére adott válaszában részleteztem, hogy ha a csúcsokra felírt vektoriális egyensúlyt meghagyva a rendszerben egy globális anizotrópiát hozunk létre, például nyírással, akkor erre a rendszer gyengén anizotróp választ ad. Vagyis az exponensek (tehát az univerzalitás osztály is) megmarad, csak például a korrelációs hossz a sajátirányokban eltérő prefaktort kap, a megfelelő irány átskálázásával visszakapnánk az izotróp esetet. Akkor sem kapunk más univerzalitási osztályt, ha nem a vektoriális egyensúlyt adó erők abszolút értékét, hanem ennek egy megfelelően reguláris függvényét használjuk a küszöbölésre, illetve a kritikustól való távolság kifejezésére. (Mi annak idején vizsgáltuk nemlineáris erőtvörvényre a differenciális rugóállandót: ez a Hertz törvény esetén az erő köbgyökével egyenlő. Mivel a köbgyök függvény egy véges érték körül nem szinguláris és monoton, a skálázási exponensek nem változnak.)

Változik viszont az univerzalitás osztály, ha a kényszert, vagyis a vektoriális egyensúlyt változtatjuk meg. Ilyen például a szemcsés erőhálózatok ún. q -modellje [7, 8], amelyben az erők egyensúlyát csak a függőleges komponensre követeljük meg, azaz a vektoriális egyensúlyt skalár egyensúly váltja fel. Az ilyen modell erősen anizotróp, például a ν exponens (amely a korrelációs hossz skálázását határozza meg a küszöb kritikustól való eltérésének függvényében) függőleges irányban ($\nu_{\parallel}$) és erre merőlegesen ($\nu_{\perp}$) különböző értéket vesz fel: 2D-ban $\nu_{\parallel} \approx 3.77$ és $\nu_{\perp} \approx 2.12$ [9]. (Meg kell említeni, hogy 11. fejezetben a q -modellre $\nu \approx 3.1$ értéket közöltem, amit úgy kaptunk numerikusan, hogy a skálázásnál nem tekin-

¹ Vagyis amelyben egy adott szabályos vagy rendezetlen rácson a kötésekhez egy valós számot rendelünk, és azon fűrtök tulajdonságait vizsgáljuk, amelyeket egy adott küszöbértéknél nagyobb számmal jelzett kötések generálnak, a küszöbérték függvényében.

tettük különbözőnek a függőleges és vízszintes irányt.) Összehasonlításként a vektoriális egyensúllyal jellemzett erőhálózatokra $v = 1.6 \pm 0.1$, míg klasszikus (izotróp) perkolációra $v = 4/3$, az irányított perkolációra pedig $v_{\parallel} \approx 1.733$ és $v_{\perp} \approx 1.097$.

(3) Kérem részletezze, hogyan függnek a torlódási átmenet kritikus exponensei a súrlódási együtthatótól, rugalmas gömbökből álló szemcsés rendszerek esetén. Itt is várhatóak univerzalizációs osztályok?

Tekintsük először az egyszerűbb, a súrlódásmentes esetet ($\mu = 0$). Legyen a gömbök közötti potenciál arányos n^{α} -al, ahol n a részecskék közötti átfedés, $\alpha = 2$ jelenti a féloldali harmonikus potenciált, $\alpha = 5/2$ pedig a nemlineáris Hertz erőtvörvénynek felel meg. Jelöljük ϕ -vel a térkitöltést, ennek értéke a torlódási átmenetben ϕ_c . A p nyomásra, B térfogati rugalmassági modulusra, G nyírási modulusra, valamint a z koordinációs szám és ennek z_c kritikus (a torlódási átmeneti pontban felvett) értékének különbségére a következő skálázási relációk adódnak [10]:

$$p \sim |\phi - \phi_c|^{\alpha-1} \quad (1)$$

$$B \sim |\phi - \phi_c|^{\alpha-2} \quad (2)$$

$$G \sim |\phi - \phi_c|^{\alpha-3/2} \quad (3)$$

$$z - z_c \sim |\phi - \phi_c|^{1/2} \quad (4)$$

Ezekből az első kettő az erőtvörvény egyszerű következménye; lényeges pont, hogy a skálaexponensek függenek az erőtvörvenytől, azaz nem univerzálisak. A (3). egyenletet a (2) és (4) segítségével átírhatjuk

$$G/B \sim z - z_c \quad (5)$$

alakba, ami viszont (4)-hez hasonlóan nem tartalmaz α -függést. Olyan viselkedést találunk tehát, amely egyrészt a számos mennyiség skálázása alapján emlékeztet a folytonos fázisátalakulások kritikus jelenségeire, viszont különbözik is azoktól, hiszen bizonyos skálaexponensek nem univerzálisak (hanem függenek a mikroszkopikus erőtvörvenytől). A kritikus viselkedést divergens idő- és távolságskálák megjelenése is jelzi: a rezgési állapotok spektruma anomális, amelyet egy bizonyos ω^* frekvencia (ill. ehhez tartozó hullámhossz) jellemez [11]:

$$\omega^* |\phi - \phi_c|^{-(\alpha-2)/2} \sim |\phi - \phi_c|^{1/2}, \quad (6)$$

ahol a $|\phi - \phi_c|^{-(\alpha-2)/2}$ szorzófaktor az összes frekvencia erőtvörvény miatti triviális skálázását kompenzálja. Továbbá a (4). skálázási összefüggésben az $1/2$ exponens nemcsak az erőtvörvenytől független, hanem 2D-ban és 3D-ban is ugyanaz az értéke, így az átmenet felső kritikus dimenziója 2-nek tekinthető [12].

Súrlódó ($\mu > 0$) esetben az (1),(2),(5) összefüggések érvényben maradnak, azzal a változtatással, hogy z_c helyére z_{izo} -t, azaz az izosztatikus koordinációs számot kell írni; (6) helyére pedig a 12. fejezetben is említett

$$\omega^* |\phi - \phi_c|^{-(\alpha-2)/2} \sim z - z_{izo}, \quad (7)$$

kerül (ami $\mu = 0$ esetben is igaz).

Lényeges viszont, hogy $0 < \mu < \infty$ esetben a torlódási átmenetben

$$z(\phi \rightarrow \phi_c) = z_{\text{torl}} \neq z_{\text{izo}}^\mu, \quad (8)$$

vagyis a torlódási átmenetben a rendszer nem izosztatikus. Így még ha a torlódási pontban észlelünk is (erőtörvény-függő) skálázást [(1),(2)], a (7). összefüggés nem eredményez divergáló idő- és távolságskálát, és nincs a nyírási módusok sem válnak végtelenül puhává a kompressziós módusokhoz képest. Ezért a $0 < \mu < \infty$ esetet nem is tekintjük kritikusnak.

Viszont $\mu = \infty$ esetben már $z(\phi \rightarrow \phi_c) = z_{\text{izo}}^\mu$, azaz ugyanazt a kritikus viselkedést kapjuk (ugyanazokkal az exponensekkel), mint a $\mu = 0$ esetben, (4) is érvényes marad amennyiben z_c -t kicseréljük z_{izo} -ra; csupán μ_{izo}^0 és μ_{izo}^μ értéke fog eltérni. Összefoglalva: a torlódási átmenet a sűrűlódásmentes ($\mu = 0$) és a végtelenül nagy sűrűlódási együttható határesetében kritikus, a két eset ugyanabban az univerzalitáscsoportban van, míg a köztes $0 < \mu < \infty$ eset nem kritikus.

Budapest, 2016. február 1.

Somfai Ellák

Hivatkozások

- [1] Sasamoto T, Spohn H: One-dimensional Kardar-Parisi-Zhang equation: An exact solution and its universality; Phys. Rev. Lett. **104**, 230602 (2010)
- [2] Sasamoto T, Spohn H: The 1+1-dimensional Kardar-Parisi-Zhang equation and its universality class; J. Stat. Mech.-Theory Exp., P11013 (2010)
- [3] Kriecherbauer T, Krug J: A pedestrian's view on interacting particle systems, KPZ universality and random matrices; J. Phys. A-Math. Gen. **43**, 403001 (2010)
- [4] Takeuchi KA, Sano M: Evidence for geometry-dependent universal fluctuations of the Kardar-Parisi-Zhang interfaces in liquid-crystal turbulence; J. Stat. Phys. **147**, 853-890 (2012)
- [5] Ódor G, Pastor-Satorras R: Slow dynamics and rare-region effects in the contact process on weighted tree networks; Phys. Rev. E **86**, 026117 (2012)
- [6] Hohenberg PC, Halperin BI: Theory of dynamic critical phenomena; Rev. Mod. Phys. **49**, 435-479 (1977)

- [7] Liu CH, Nagel SR, Schecter DA, Coppersmith SN, Majumdar S, Narayan O, Witten TA: Force fluctuations in bead packs; *Science* **269**, 513-515 (1995)
- [8] Da Silva M, Rajchenbach J: Stress transmission through a model system of cohesionless elastic grains; *Nature* **406**, 708-710 (2000)
- [9] Pastor-Satorras R, Miguel MC: Percolation analysis of force networks in anisotropic granular matter; *J. Stat. Mech.-Theory Exp.*, P02008 (2012)
- [10] O'Hern CS, Silbert LE, Liu AJ, Nagel SR: Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder; *Phys. Rev. E* **68**, 011306 (2003)
- [11] Silbert LE, Liu AJ, Nagel SR: Vibrations and diverging length scales near the unjamming transition; *Phys. Rev. Lett.* **95**, 098301 (2005)
- [12] Goodrich CP, Liu AJ, Nagel SR: Finite-size scaling at the jamming transition; *Phys. Rev. Lett.* **109**, 095704 (2012)