

# The Study of Dynamical Phase Transitions of a Random Walker on a One-dimensional Lattice with Reflecting Boundaries

Seyedeh Razieh Masharin \*

Department of Physics, College of Science, Hamedan Branch, Islamic Azad University, Hamedan, Iran

Received: 01.11.2021 Final revised: 15.07.2023 Accepted: 04.03.2024

Doi: [10.22055/jrmb.2024.18980](https://doi.org/10.22055/jrmb.2024.18980)

## Abstract

In this paper, we study dynamical phase transitions of a random walker which moves on a one-dimensional lattice with reflecting boundaries. The dynamical activity, which is defined as the number of configuration changes in a dynamical trajectory, is considered as the order parameter. We study the dynamical phases in the long-time limit by calculating the scaled cumulant generating function of the activity. It turns out that the system consists of six dynamical phases with both continuous and discontinuous phase transitions. Numerical investigations confirm our analytical results in the thermodynamic limit.

**Keywords:** Dynamical Phase Transitions, Dynamical Activity Production Rate, Large Deviation Theory, Ensemble of Trajectories

\* Corresponding Author: masharian @ gmail.com



## مطالعه گذار فازهای دینامیکی یک ولگشت ساده روی شبکه‌ای یک بعدی

## با مرزهای انعکاسی

سیده راضیه مشعریان\*

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، واحد همدان، دانشگاه آزاد اسلامی، همدان، ایران

دریافت: ۱۴۰۰/۰۸/۱۰ ویرایش نهائی: ۱۴۰۲/۰۴/۲۴ پذیرش: ۱۴۰۲/۱۲/۱۴

Doi: [10.22055/jrmb.2024.18980](https://doi.org/10.22055/jrmb.2024.18980)

## چکیده

در این مقاله به مطالعه گذار فازهای دینامیکی یک ولگشت ساده که روی شبکه‌ای یک بعدی با مرزهای انعکاسی حرکت می‌کند، می‌پردازیم. فعالیت دینامیکی دستگاه که عبارتست از تعداد دفعات تغییر پیکربندی آن در یک مسیر دینامیکی، به‌عنوان پارامتر نظم دینامیکی در نظر گرفته می‌شود. با محاسبه تابع مولد کیومولنت مقیاس بندی شده در حد زمان‌های طولانی فازهای دینامیکی دستگاه را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. نتایج محاسبات وجود شش فاز دینامیکی را نشان می‌دهند که میان آنها گذار فازهای پیوسته و ناپیوسته رخ می‌دهد. بررسی‌های عددی به‌دست آمده نتایج تحلیلی را در حد ترمودینامیک تأیید می‌کنند.

**کلیدواژگان:** گذار فازهای دینامیکی، نرخ تولید فعالیت دینامیکی، تئوری انحراف بزرگ، مجموعه آماری مسیرها

## مقدمه

است، استفاده نمود [۵،۶]. مطابق با این رویکرد، می‌بایست مجموعه‌ای از مسیرهای دینامیکی مسأله را در نظر گرفت که پارامترهای نظم دینامیکی مناسبی روی آنها تعریف شده‌اند. افت و خیز این پارامترهای نظم که نسبت به زمان مشاهده‌پذیرهای دینامیکی فزونور می‌باشند، مشخص‌کننده دینامیک دستگاه خواهد بود. یکی از این پارامترهای نظم، فعالیت دینامیکی<sup>۳</sup> دستگاه است که به‌صورت تعداد تغییر پیکربندی دستگاه در یک مدت زمان مشاهده معین تعریف می‌شود. در سال‌های اخیر از این مشاهده‌پذیر به‌منظور مطالعه رفتارهای دینامیکی در مواردی مانند مدل‌های شیشه‌ای [۷،۸] و شبکه‌های پروتئینی [۹]

افت و خیزهای دینامیکی<sup>۱</sup> یکی از مشخصه‌های دستگاه‌های بس‌ذره‌ای است و مطالعه این پدیده در طول دهه‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. اخیراً مطالعه تئوری و عددی آمار افت و خیزهای نادر در مدل‌های گازی شبکه‌ای واداشته [۱،۲]، فرآیندهای طردی [۳] و فرآیندهای برد صفر<sup>۲</sup> [۴]، حضور مجموعه‌های همزیستی از مسیرها و به‌اصطلاح گذار فازهای دینامیکی میان آنها را نشان داده است. به‌منظور مطالعه رفتار دستگاه از نقطه نظر دینامیکی، می‌توان از مکانیک آماری مسیرها که توسط روئله توسعه یافته

\*نویسنده مسئول: masharian@gmail.com

<sup>1</sup>Dynamical fluctuations<sup>2</sup>Zero range processe<sup>3</sup>Dynamical activity

فاز دینامیکی متفاوت است که میان آنها گذار فازهای دینامیکی پیوسته و ناپیوسته مشاهده می‌شود. هدف ما در این مقاله این است که افت و خیزهای نادر در نرخ تولید فعالیت دستگاهی یک بعدی شامل یک ولگشت ساده با مرزهای انعکاسی را مطالعه کنیم. برای این دستگاه با فضای پیکربندی متناهی، SCGF فعالیت دینامیکی دستگاه برابر بزرگترین ویژه مقدار یک هامیلتونی تعمیم یافته می‌باشد [۱۵،۱۶]. این هامیلتونی تعمیم یافته که آن را  $\tilde{H}$  می‌نامیم، از ضرب عناصر غیر قطری هامیلتونی دستگاه، که همان عملگر تحول زمانی تصادفی دستگاه است، در یک عامل نمایی به دست می‌آید. این عامل نمایی پرش‌های ولگشت ساده را که در فعالیت دستگاه سهم دارند، می‌شمارد. در اینجا توانسته‌ایم  $\tilde{H}$  وابسته به افت و خیزهای فعالیت ولگشت ساده را به طور تحلیلی با کمک نهاده موج تخت قطری کنیم. با مطالعه بزرگترین ویژه مقدار  $\tilde{H}$  در حد طول‌های بینهایت، وجود شش فاز دینامیکی را نشان داده‌ایم که میان آنها گذار فازهای پیوسته و ناپیوسته رخ می‌دهد. در ادامه با محاسبه ویژه بردارهای چپ و راست  $\tilde{H}$  متناظر با بزرگترین ویژه مقدار آن توانسته‌ایم فازهای دینامیکی را تفسیر کنیم. اعتبار محاسبات تحلیلی ما با مقایسه نتایج تحلیلی با آنچه که از قطری کردن عددی هامیلتونی تعمیم یافته به دست آمده است، چک شده است.

مطالب این مقاله به صورت زیر تنظیم شده است. در بخش ۲ مدل را تعریف کرده و مباحث مقدماتی ریاضی را در بخش ۳ توضیح داده‌ایم. در بخش ۴ هامیلتونی تعمیم یافته را به طور تحلیلی قطری کرده و رفتار فاز دینامیکی مدل را در بخش ۵ مورد مطالعه قرار داده‌ایم.

استفاده شده است. همچنین با تعریف دینامیکی مشاهده پذیرهایی مانند انرژی و مغناطش، فازهای دینامیکی دستگاه‌های اسپینی مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۰،۱۱]. در این رهیافت، مسیرها بر اساس یک پارامتر نظم دینامیکی دسته بندی شده و ساختار مجموعه آماری مسیرها را می‌توان از ویژگی‌های تابع مولد کیومولنت مقیاس بندی شده<sup>۱</sup> (به اختصار SCGF) این پارامتر، که نقش انرژی آزاد دینامیکی را بازی می‌کند، دریافت. ساختار تحلیلی انرژی آزاد دینامیکی دستگاه، حاوی اطلاعات مربوط به گذار فازهای دینامیکی آن در فضای مسیرها است. از طرف دیگر طبق تئوری انحراف بزرگ<sup>۲</sup> که چهار چوب مناسبی برای بررسی افت و خیزهای دینامیکی به شمار می‌رود، تابع انحراف بزرگ<sup>۳</sup> را می‌توان از تبدیل لژاندر-فنچل<sup>۴</sup> SCGF مشاهده پذیر دینامیکی مورد مطالعه به دست آورد. داشتن تابع انحراف بزرگ در واقع به معنی در دست داشتن تقریب بسیار مناسبی برای تابع توزیع احتمال کمیت دارای افت و خیز، در حد زمان‌های طولانی محسوب می‌شود [۱۲،۱۳]. بدین ترتیب اطلاعات مربوط به افت و خیزهای مشاهده پذیر مورد نظر نسبت به مقدار متوسط نوعی آن، از محدوده انحرافات کوچک گرفته تا انحرافات بزرگ-موسوم به رخدادهای نادر<sup>۵</sup> در دست خواهد بود.

در مقاله [۱۴] نویسنده گذار فازهای دینامیکی را در یک دستگاه غیر تعادلی یک بعدی با مرزهای باز که ذرات روی آن خلق و نابود می‌شوند، مطالعه کرده‌اند. با بررسی رفتار متوسط فعالیت دستگاه، به ازای مقادیر کوچکتر از مقدار نوعی<sup>۶</sup> آن در حالت پایا و در حد زمان مشاهده طولانی دریافت‌اند که دستگاه دارای سه

<sup>4</sup>Legendr- Fenchel transformation

<sup>5</sup>Rare events

<sup>6</sup>Typical value

<sup>1</sup>Scaled Cummulant Generating Function (SCGF)

<sup>2</sup>Large deviation theory

<sup>3</sup>Large deviation function

این مدل تحت تبدیل‌های  $\alpha \rightarrow \beta, i \rightarrow L - i + 1, p \rightarrow q$ ، جایگاه ولگشت ساده روی شبکه را نشان می‌دهد. لذا در انجام محاسبات تنها مورد  $q > p$  را در نظر می‌گیریم. نتایج به‌راحتی برای  $q < p$  نیز به‌دست می‌آید.

### مباحث مقدماتی ریاضی در محاسبه افت و

#### خیزهای فعالیت دینامیکی دستگاه

تئوری انحراف بزرگ کاهش نمائی احتمالات افت و خیزهای بزرگ در دستگاه‌های تصادفی را توضیح می‌دهد. این احتمالات در بسیاری از علوم مانند آمار و اقتصاد، حائز اهمیت می‌باشند. مطابق با این تئوری، تابع توزیع احتمال برای فعالیت ولگشت ساده، به‌عنوان مشاهده پذیر دینامیکی، در حد زمان‌های طولانی به‌صورت زیر می‌باشد [۱۲، ۱۷]:

$$P\left(\frac{K}{t} = k\right) \approx e^{-I(k)} \quad ۱$$

$K$  فعالیت دینامیکی دستگاه است که تعداد کل پرش‌های ذره را می‌شمارد. در اینجا نرخ فعالیت را به‌صورت فعالیت در واحد زمان،  $k = \frac{K}{t}$  تعریف می‌کنیم.  $I(k)$  تابع انحراف بزرگ است که آهنگ انحراف فعالیت ولگشت ساده در واحد زمان از مقدار میانگینش را تعیین می‌کند. تابع انحراف بزرگ، مطابق با تئوری گارتنر-الیس<sup>۱</sup> [۱۸]، تبدیل لژاندر-فنچل بزرگترین ویژه‌مقدار یک هامیلتونی تعمیم یافته است [۱۲، ۱۹]:

$$I(k) = -\min_s (\Lambda^*(s) + k s) \quad ۲$$

در ادامه مقایسه بین فازهای دینامیکی دستگاه در دو ناحیه که متوسط فعالیت ولگشت ساده کوچکتر و بزرگتر از مقدار متوسط نوعی آن در حالت پایا است، را با توجه به ویژه‌بردارهای راست و چپ هامیلتونی تعمیم یافته انجام داده‌ایم. در بخش نهایی نیز نتیجه‌گیری را خواهیم داشت.

### تعریف مدل

مدلی که در این مقاله مورد مطالعه قرار می‌گیرد یک دستگاه یک بعدی تصادفی شامل شبکه‌ای به طول  $L$  با مرزهای انعکاسی می‌باشد. بر روی این شبکه یک ولگشت ساده با آهنگ  $p$  به جایگاه سمت راست و با آهنگ  $q$  به جایگاه سمت چپ می‌پرد. این ولگشت در مرز چپ (اولین جایگاه شبکه) با آهنگ  $\alpha$  و در مرز راست (آخرین جایگاه شبکه) با آهنگ  $\beta$  به داخل شبکه برمی‌گردد. این دستگاه شامل  $L$  پیکربندی است که با پرش ولگشت ساده از جایگاهی به جایگاه دیگر، پیکربندی دستگاه تغییر می‌کند. تعداد دفعات تغییر پیکربندی دستگاه در یک مدت زمان مشاهده معین، به‌عنوان فعالیت دینامیکی دستگاه تعریف می‌شود؛ یا به بیان ساده‌تر تعداد کل پرش‌های ذره در یک زمان معین را می‌شمارد. با مطالعه افت و خیزهای این کمیت می‌توان دینامیک دستگاه را مورد بررسی قرار داد. از آنجائی که این شبکه تنها شامل یک ولگشت ساده است، یکی از ساده‌ترین مدل‌ها به حساب می‌آید. این سادگی به‌ما این امکان را می‌دهد که بتوانیم یک جواب تحلیلی در حد طول‌های بینهایت به‌دست آوریم. با توجه به اینکه تعداد مدل‌های دقیقاً حل پذیر محدود می‌باشند، این مدل می‌تواند به‌عنوان یک مدل مرجع پیش‌بینی شود.

<sup>۱</sup> Gartner-Ellis theorem

فرض کامل بودن بردار پایه  $\{|\sigma\rangle\}$  مؤلفه‌های ماتریس  $\tilde{H}$  در این پایه به صورت زیر است:

$$\langle\sigma|\tilde{H}|\sigma'\rangle = e^{-s}\omega_{\sigma\rightarrow\sigma'} - r(\sigma)\delta_{\sigma,\sigma'} \quad ۷$$

$r(\sigma)$  که مؤلفه‌های قطری ماتریس  $\tilde{H}$  است به صورت جمع روی همه آهنگ‌های خروج از پیکربندی  $\sigma$  یعنی  $r(\sigma) = \sum_{\sigma'\neq\sigma}\omega_{\sigma\rightarrow\sigma'}$  تعریف می‌شود. با تحلیل خصوصیات بزرگترین ویژه مقدار هامیلتونی تعمیم یافته  $\tilde{H}$  می‌توان افت و خیزهای یک دستگاه دینامیکی را مورد بررسی قرار داد [۱۲]. منفی بزرگترین ویژه مقدار  $\Lambda^*(s)$  انرژی آزاد دینامیکی دستگاه را تعیین می‌کند. ناپیوستگی‌ها در مشتقات این ویژه مقدار نسبت به کمیت  $s$ ، رفتار فازی دستگاه را مشخص می‌کند. بدین ترتیب که ناپیوستگی در مشتقات اول و دوم به ترتیب گذار فازهای دینامیکی مرتبه اول و دوم را نشان می‌دهند. در اینجا لازم به ذکر است که این مشتقات به ترتیب میانگین و واریانس نرخ فعالیت دستگاه را تعریف می‌کنند. طوری که  $\langle k \rangle_s = -\frac{d\Lambda^*(s)}{ds}$  از طرفی دیگر ویژه بردار راست (چپ)  $\tilde{H}$  متناظر با بزرگترین ویژه مقدار آن تفسیر فیزیکی جالبی دارد. این کمیت که آنرا در متن با  $\langle\Lambda^*(s)|\Lambda^*(s)\rangle$  نشان می‌دهیم در حقیقت بردار احتمال پیکربندی نهایی (اولیه) دستگاه است. توجه کنید از آنجایی که هامیلتونی تعمیم یافته در  $s=0$  برابر با عملگر تحول زمانی تصادفی است، لذا  $\Lambda^*(s=0) = 0$  است. در نهایت منفی اولین مشتق بزرگترین ویژه مقدار نسبت به  $s$  در  $s=0$ ، متوسط نرخ فعالیت ولگشت ساده در حالت پایا یا مقدار نوعی در حالت پایا را می‌دهد:

که در آن  $\Lambda^*(s)$  بزرگترین ویژه مقدار هامیلتونی تعمیم یافته  $\tilde{H}$  می‌باشد. به منظور به دست آوردن مؤلفه‌های این هامیلتونی تعمیم یافته مروری مختصر بر نتایج تئوری مجموعه آماری مسیرها<sup>۱</sup> خواهیم داشت [۵]. در این راستا یک فرآیند مارکوف زمان پیوسته که فضای پیکربندی‌های آن را با  $\{\sigma\}$  نشان می‌دهیم، در نظر می‌گیریم.  $P(\sigma|K, t)$  احتمال این است که دستگاه در زمان  $t$  در پیکربندی  $\sigma$  باشد، در حالی که پیکربندی  $K$  بار تا زمان  $t$  تغییر داده است. احتمال  $P(\sigma|K, t)$  معادله اصلی<sup>۲</sup> را برآورده می‌کند:

$$\frac{d}{dt}P(\sigma|K, t) = \sum_{\sigma'\neq\sigma}\omega_{\sigma\rightarrow\sigma'}P(\sigma'|K-1, t) - \sum_{\sigma'\neq\sigma}\omega_{\sigma\rightarrow\sigma'}P(\sigma|K, t) \quad ۳$$

که در آن  $\omega_{\sigma\rightarrow\sigma'}$  آهنگ گذار مستقل از زمان برای تغییر پیکربندی دستگاه از  $\sigma$  به  $\sigma'$  است. حال با حاصل ضرب طرفین معادله اصلی<sup>۳</sup> در  $e^{-sK}$  و جمع بندی روی مقادیر  $K \in [0, \infty)$  داریم:

$$\frac{d}{dt}\tilde{P}(\sigma|s, t) = \sum_{\sigma'\neq\sigma}e^{-s}\omega_{\sigma\rightarrow\sigma'}\tilde{P}(\sigma'|s, t) - \sum_{\sigma'\neq\sigma}\omega_{\sigma\rightarrow\sigma'}\tilde{P}(\sigma|s, t) \quad ۴$$

که در آن  $\tilde{P}(\sigma|s, t)$  به صورت زیر تعریف شده است:

$$\tilde{P}(\sigma|s, t) = \sum_{K=0}^{\infty}e^{-sK}P(\sigma|K, t). \quad ۵$$

کمیت  $s$  میدان شمارنده فعالیت دینامیکی دستگاه نامیده می‌شود. با کمک فرمالیزم هامیلتونی کوآنتومی<sup>۳</sup> [۲۰] می‌توان معادله<sup>۴</sup> را به صورت زیر نوشت:

$$\frac{d}{dt}|\tilde{P}(t)\rangle_s = \tilde{H}|\tilde{P}(t)\rangle_s \quad ۶$$

در اینجا  $|\tilde{P}(t)\rangle_s$ ، بردار احتمال است که به صورت  $|\tilde{P}(t)\rangle_s = \sum_{\sigma}\tilde{P}(\sigma|s, t)|\sigma\rangle$  تعریف می‌شود. با

<sup>3</sup>Quantum Hamiltonian formalism

<sup>1</sup>Theory of ensembles of trajectories

<sup>2</sup>Master equation

### قطری کردن هامیلتونی تعمیم یافته

$\tilde{H}$  یک ماتریس سه قطری  $L \times L$  بعد است که در پایه  $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |L\rangle\}$  مطابق با رابطه ۷ نمایش ماتریسی زیر را دارد:

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} -\alpha & q e^{-s} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \alpha e^{-s} & -(p+q) & q e^{-s} & \dots & \vdots & 0 & 0 \\ 0 & p e^{-s} & -(p+q) & \ddots & 0 & \vdots & 0 \\ \vdots & 0 & p e^{-s} & \ddots & q e^{-s} & 0 & \vdots \\ 0 & \vdots & 0 & \ddots & -(p+q) & q e^{-s} & 0 \\ 0 & 0 & \vdots & \dots & p e^{-s} & -(p+q) & \beta e^{-s} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & p e^{-s} & -\beta \end{pmatrix}$$

$$\langle k \rangle_{s=0} = - \left. \frac{d\Lambda^*(s)}{ds} \right|_{s=0} \quad ۸$$

مقادیر مثبت و منفی میدان شمارنده  $S$  مربوط به مقادیر غیر نوعی<sup>۱</sup> فعالیت و لگشت ساده می‌باشد. بدین ترتیب که مقادیر مثبت میدان شمارنده، متوسط نرخ فعالیت و لگشت ساده کوچکتر از مقدار نوعی آن در حالت پایا و مقادیر منفی میدان شمارنده، متوسط نرخ فعالیت و لگشت ساده بزرگتر از مقدار نوعی آن در حالت پایا را نشان می‌دهد [۵ و ۱۰ و ۱۲ و ۱۳].

$$p e^{-s} C_{n-1} - (p+q) C_n + \beta e^{-s} C_{n+1} = \Lambda C_n \quad ۱۲$$

$$p e^{-s} C_{L-2} - (p+q) C_{L-1} + \beta e^{-s} C_L = \Lambda C_{L-1} \quad ۱۳$$

$$p e^{-s} C_{L-1} - \beta C_L = \Lambda C_L \quad ۱۴$$

که  $n$  در معادله ۱۲ مقادیر  $n = 3, 4, \dots, L-2$  را می‌پذیرد. حال می‌توان با کمک نهاده موج تخت<sup>۲</sup> ویژه مقادیر و مؤلفه‌های  $C_n$  در ویژه بردارهای متناظر را به دست آورد. برای راحتی محاسبات متغیرهای زیر را تعریف می‌کنیم:

$$\eta \equiv \sqrt{\frac{p}{q}}, \quad \xi \equiv 1 - \frac{\beta}{q}, \quad \zeta \equiv 1 - \frac{\alpha}{p}.$$

ابتدا با در نظر گرفتن

$$C_n = \eta^n (a(z) z^n - a(z^{-1}) z^{-n})$$

ساختار این ماتریس مشابه عملگر تحول زمانی یک و لگشت ساده است که روی شبکه‌ای به طول  $L$  با مرزهای انعکاسی حرکت می‌کند. البته می‌بایست دقت کرد که این عملگر تحول، یک ماتریس تصادفی نمی‌باشد. اکنون ویژه بردارها و ویژه مقادیر  $\tilde{H}$  را با همان رویکردی که در [۲۱، ۲۲] استفاده شده است، به دست می‌آوریم، با نوشتن:

$$\tilde{H} |\Lambda(s)\rangle = \Lambda(s) |\Lambda(s)\rangle \quad ۹$$

و در نظر گرفتن  $|\Lambda(s)\rangle = \sum_{n=1}^L C_n |n\rangle$ ، معادلات حاکم بر  $C_n$  ها به صورت زیر است:

$$-\alpha C_1 + q e^{-s} C_2 = \Lambda C_1 \quad ۱۰$$

$$\alpha e^{-s} C_1 - (p+q) C_2 + q e^{-s} C_3 = \Lambda C_2 \quad ۱۱$$

<sup>2</sup> Plane Wave Ansats

<sup>1</sup>Non-typical value

برای  $n = 2, 3, \dots, L - 1$  و جای گذاری در معادله مربوط به بدنه شبکه ۱۲ می توان ویژه مقادیر را به صورت زیر به دست آورد:

$$\Lambda(s) = -(p + q) + e^{-s} \sqrt{pq} (z + z^{-1}). \quad 15$$

سپس با جای گذاری:

$$C_1 = A(a(z)z - a(z^{-1})z^{-1})$$

$$C_L = B(a(z)z^L - a(z^{-1})z^{-L})$$

در معادلات ۱۱ و ۱۳ می توان ضرائب  $A$  و  $B$  را به دست آورد و فرم کلی مؤلفه های  $C_n$  ویژه بردار  $\Lambda(s)$  را به صورت زیر نوشت:

$$C_n = \eta^n \frac{a(z)z^n - a(z^{-1})z^{-n}}{(1-\zeta)^{\delta_{n,1}}(1-\xi)^{\delta_{n,L}}} \quad 16$$

در ادامه با جای گذاری  $C_n$  از معادله ۱۶ در معادلات مرزی ۱۰ و ۱۴ می توان معادله حاکم بر  $Z$  ها و نسبت  $\frac{a(z^{-1})}{a(z)}$  را به دست آورد:

$$\frac{z^{2(L-1)}}{F(z^{-1}, \eta, \zeta) F(z^{-1}, \eta^{-1}, \xi)} = \frac{F(z, \eta, \zeta) F(z, \eta^{-1}, \xi)}{F(z, \eta, \zeta) F(z, \eta^{-1}, \xi)} \quad 17$$

$$\frac{a(z^{-1})}{a(z)} = z^2 \frac{F(z^{-1}, \eta, \zeta)}{F(z, \eta, \zeta)} = z^{2L} \frac{F(z, \eta^{-1}, \xi)}{F(z^{-1}, \eta^{-1}, \xi)} \quad 18$$

که در آن

$$F(x, y, z) = \left(x + \frac{z}{x}\right) e^{-s} - \left(yz + \frac{1}{y}\right)$$

می توان مشاهده کرد که معادله حاکم بر  $Z$  ها ۱۷،  $2L + 2$  جواب دارد. جواب های واضح این معادله  $Z = \pm 1$  است که قابل قبول نیستند، زیرا این جواب ها متناظر با ویژه بردارهای صفر می باشند. از طرفی دیگر اگر  $Z$  جواب رابطه ۱۷ باشد، آنگاه  $Z^{-1}$  نیز جواب

معادله است. این بدان معناست که  $2L$  جواب باقیمانده منجر به  $L$  ویژه مقدار خواهند شد. در نهایت می توان نشان داد که جواب های معادله ۱۷ یا فازند و یا اعداد حقیقی هستند. محاسبه جواب ها به ازای یک  $L$  معین دشوار است، اما می توان محاسبات را در حد ترمودینامیکی  $L \rightarrow \infty$  دنبال نمود. در این حد به ازای  $|z| > 1$  دو جواب حقیقی خواهیم داشت

$$z_1 = G(\eta^{-1}, \zeta, s), \quad z_2 = G(\eta, \xi, s) \quad 19$$

که  $G(x, y, z)$  به صورت زیر تعریف می شود.

$$G(x, y, z) = e^s \left(\frac{x}{2} + \frac{y}{2x}\right) \sqrt{e^{2s} \left(\frac{x}{2} + \frac{y}{2x}\right)^2 - y}$$

با جای گذاری ۱۹ در ۱۵ می توان ویژه مقادیر متناظر یعنی  $\Lambda_1(s)$  و  $\Lambda_2(s)$  را به دست آورد. همچنین بزرگترین ویژه مقدار متناظر با جواب های فازی در حد  $L \rightarrow \infty$  به صورت زیر است:

$$\Lambda_{\text{phase}}(s) = -(p + q) + 2e^{-s} \sqrt{pq} \quad 20$$

شرایطی که تحت آن  $\Lambda_1(s)$ ،  $\Lambda_2(s)$ ،  $\Lambda_{\text{phase}}(s)$  موجود می باشند در بخش بعدی بررسی خواهد شد.

### بزرگترین ویژه مقدار هامیلتونی تعمیم یافته

بزرگترین ویژه مقدار هامیلتونی تعمیم یافته به آهنگ های برهم کنشی میکروسکوپی و مقدار  $S$  وابسته است. این بخش را در دو قسمت دنبال می کنیم. در قسمت اول مورد  $S \geq 0$  (متناظر با  $k < |k|_{S=0}$ ) و در قسمت دوم مورد  $S < 0$  (متناظر با  $k > |k|_{S=0}$ ) را در نظر می گیریم.

**مورد  $S \geq 0$**

$$U(\alpha, s) > \frac{\beta}{\alpha}.$$

• ناحیه III: در این ناحیه  $\Lambda^*(s) = \Lambda_{phase}(s)$  است

$$\alpha > p \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{pe^s - \sqrt{pq}}, \quad ۲۴$$

$$\beta > q \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{qe^s - \sqrt{pq}},$$

$$s > \frac{1}{2} \ln\left(\frac{q}{p}\right).$$

در صفحه  $s = 0$  تنها ناحیه I وجود دارد. به ازای  $s > 0$  ناحیه II در کنار ناحیه I ظاهر شده که با خط همزیستی  $U(\alpha, s) = \frac{\beta}{\alpha}$  از یکدیگر جدا می‌شوند. به مجرد آنکه  $s > \frac{1}{2} \ln\left(\frac{q}{p}\right)$  می‌شود ناحیه III نیز ایجاد شده که این فاز توسط خط  $\alpha = p \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{pe^s - \sqrt{pq}}$  از ناحیه I و توسط خط  $\beta = q \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{qe^s - \sqrt{pq}}$  از ناحیه II جدا می‌شود. در حد  $s \rightarrow \infty$  این سه ناحیه باقی می‌مانند در حالی که جدایی نواحی I و II توسط خط  $\alpha = \beta$ ، جدایی ناحیه III از I توسط خط  $\alpha = \beta = p + q$  و جدایی ناحیه III از II توسط خط  $\beta = p + q$  داده می‌شود. مطابق شکل (۱-الف) تفکیک فازهای دستگاه به ازای مقدار مشخص مثبت  $s$  با خطوط مشکی رنگ مشخص شده است که در حد  $s \rightarrow \infty$  خطوط مشکی رنگ به سمت خطوط خط‌چین میل می‌کنند.

در مورد  $s \geq 0$  سه ناحیه با توجه به مقادیر  $s, \beta, \alpha$  از یکدیگر جدا می‌شوند. در هر ناحیه بزرگترین ویژه‌مقدار هامیلتونی تعمیم یافته را  $\Lambda^*(s)$  می‌نامیم که یکی از بسط‌های  $\Lambda_1(s), \Lambda_2(s), \Lambda_{phase}(s)$  خواهد بود. این سه ناحیه به ازای  $q > p$  به طور دقیق مطالعه شده و مرز نواحی از مساوی قرار دادن  $\Lambda_1(s) = \Lambda_2(s)$  و  $\Lambda_1(s) = \Lambda_{phase}(s)$ ،  $\Lambda_2(s) = \Lambda_{phase}(s)$  به صورت زیر به دست آمده است.

با مساوی قرار دادن  $\Lambda_1(s) = \Lambda_2(s)$  برای تعیین مرز دو ناحیه I و II، رابطه  $\frac{\beta}{\alpha} = U(\alpha, s)$  را خواهیم داشت که  $U(\alpha, s)$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$U(\alpha, s) = \frac{(2pq - e^{2s}(p^2 + q^2)) + (p-q)e^{2s}(\alpha - \sqrt{4q(\alpha-p)e^{-2s} + (p+q-\alpha)^2})}{(2p^2(1-e^{2s}) + 2\alpha(p-q)e^{2s})} \quad ۲۱$$

• ناحیه I: در این ناحیه  $\Lambda^*(s) = \Lambda_1(s)$  است

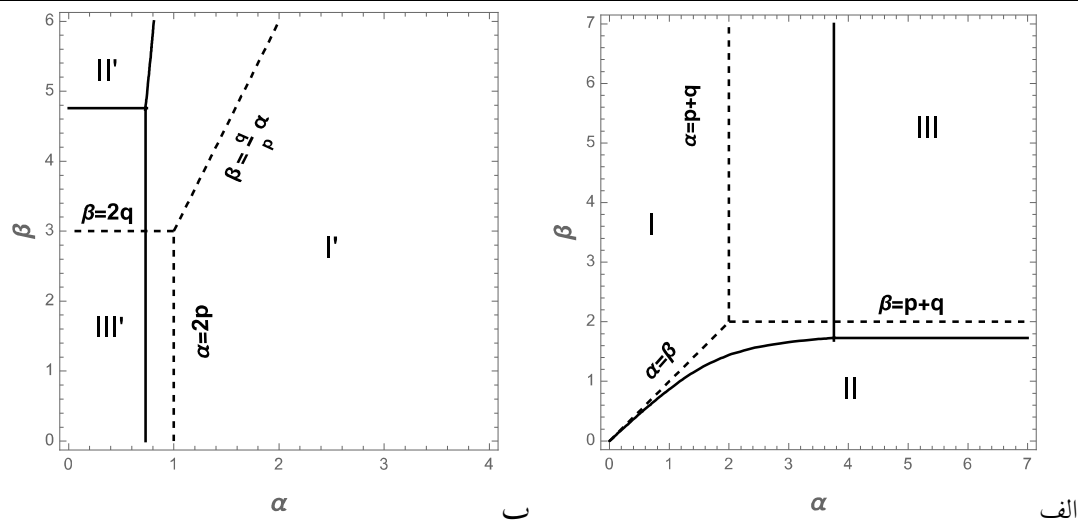
$$s > \frac{1}{2} \ln\left(\frac{q}{p}\right), U(\alpha, s) < \frac{\beta}{\alpha}, \alpha < p \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{pe^s - \sqrt{pq}}. \quad ۲۲$$

$$s < \frac{1}{2} \ln\left(\frac{q}{p}\right), U(\alpha, s) < \frac{\beta}{\alpha}.$$

• ناحیه II: در این ناحیه  $\Lambda^*(s) = \Lambda_2(s)$  است

$$\beta < q \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{qe^s - \sqrt{pq}}, \quad ۲۳$$





شکل ۱. تفکیک فازهای دینامیکی به ازای  $p = 0.5, q = 1.5$ . در شکل الف: خطوط پررنگ به ازای  $s = 1$  و خطوط نقطه چین به ازای  $s \rightarrow \infty$  و در شکل ب: خطوط پررنگ به ازای  $s = -1$  و خطوط نقطه چین به ازای  $s \rightarrow -\infty$  رسم شده است.

$$\beta > q \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{qe^s - \sqrt{pq}}, s <$$

$$\frac{1}{2} \ln\left(\frac{p}{q}\right), U(\alpha, s) < \frac{\beta}{\alpha}$$

• ناحیه III: در این فاز  $\Lambda^*(s) = \Lambda_{phase}(s)$  می باشد

$$\alpha < p \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{pe^s - \sqrt{pq}},$$

$$\frac{1}{2} \ln\left(\frac{p}{q}\right) < s < \frac{1}{2} \ln\left(\frac{4pq}{(p+q)^2}\right).$$

$$\alpha < p \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{pe^s - \sqrt{pq}},$$

$$s < \frac{1}{2} \ln\left(\frac{p}{q}\right),$$

$$\beta < q \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{qe^s - \sqrt{pq}}.$$

در این ناحیه نیز می توان نمودار فاز را به ازای مقادیر معین منفی  $S$  توصیف کرد.

به ازای  $s < 0$  تنها ناحیه I وجود دارد. به مجرد آنکه  $s < \frac{1}{2} \ln\left(\frac{4pq}{(p+q)^2}\right)$  شود، ناحیه

مورد  $s < 0$

در این مورد نیز ناحیه  $s < 0$  بسته به مقادیر  $\alpha, \beta, s$  به سه ناحیه مجزا تفکیک می گردد. این سه ناحیه را با I، II و III نمایش می دهیم. علت وجود پریم ها این است که رفتار ویژه بردارهای متناظر با بزرگترین ویژه مقادیر هامیلتونی تعمیم یافته در دو ناحیه  $s \geq 0$  و  $s < 0$  متمایز می باشد که در بخش بعدی به تفصیل راجع به این موضوع صحبت خواهیم کرد. مرزهای این سه ناحیه را می توان به طور دقیق به صورت زیر تفکیک کرد:

• ناحیه I: در این فاز  $\Lambda^*(s) = \Lambda_1(s)$  می باشد

۲۵

$$\alpha > p \frac{(p+q)e^s - 2\sqrt{pq}}{pe^s - \sqrt{pq}}, U(\alpha, s) > \frac{\beta}{\alpha}$$

• ناحیه II: در این فاز  $\Lambda^*(s) = \Lambda_2(s)$  می باشد

۲۶

را در این فضای سه بعدی، که با فرض اولیه  $q > p$  رسم شده است، توضیح داد به‌ازای مقادیر معینی از  $\beta, \alpha$  خطوطی موازی با محور  $S$  در نظر می‌گیریم. بدین ترتیب رفتار انرژی آزاد دینامیکی دستگاه را به‌ازای مقادیر مشخصی از آهنگ‌های گذار، با تغییر پارامتر کنترل  $S$  بررسی می‌کنیم. با حرکت در راستای این خطوط بسته به مقدار  $\alpha$  و  $\beta$  می‌توان تنها از یک فاز دینامیکی و یا از فازهای دینامیکی متفاوتی عبور کرد. واضح است که وجود ناپیوستگی در مشتقات اول یا دوم انرژی آزاد دینامیکی نسبت به پارامتر کنترل  $S$  حاکی از وقوع گذار فازهای دینامیکی مرتبه اول (پیوسته) یا دوم (ناپیوسته) می‌باشد. در مرز نواحی I و II (I و II) یک گذار فاز مرتبه اول به‌ازای  $S = S_c$  و در مرز نواحی I و III (I و III) و نواحی II و III (II و III) گذار فازهای مرتبه دوم به ترتیب در  $S_\beta$  و  $S_\alpha$  مشاهده می‌شود. مقادیر بحرانی پارامتر کنترل  $S$  در این گذار فازهای دینامیکی به ترتیب عبارتست از:

$$S_c = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{(\alpha q - \beta p)^2}{(\alpha - \beta)(-\alpha \beta (q - p) + \alpha q^2 - \beta p^2)} \right), \quad 28$$

$$S_\alpha = \ln \left( \sqrt{\frac{q}{p} \frac{\alpha - 2p}{\alpha - q - p}} \right),$$

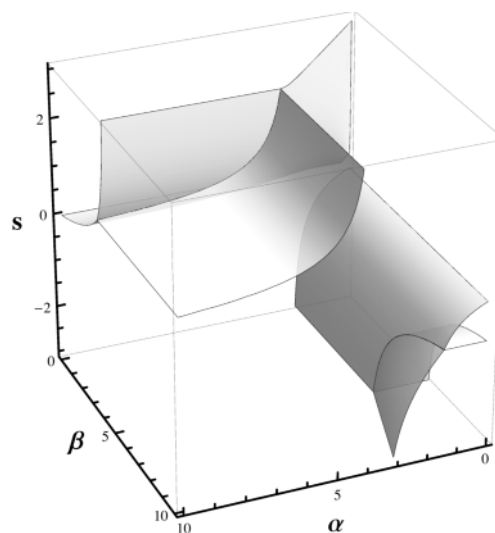
$$S_\beta = \ln \left( \sqrt{\frac{p}{q} \frac{\beta - 2q}{\beta - q - p}} \right).$$

مقادیر  $S_c, S_\beta, S_\alpha$  بسته به مقادیر  $\alpha$  و  $\beta$  می‌توانند در ناحیه  $S > 0$  یا  $S < 0$  قرار گیرند.

### تفسیر فازهای دینامیکی دستگاه برحسب ویژه‌بردارهای هامیلتونی تعمیم یافته

اکنون می‌خواهیم ادعای خود مبنی بر وجود گذار فازهای دینامیکی را با به‌دست آوردن ویژه‌بردارهای راست و چپ عملگر  $\tilde{H}$  اثبات کنیم. با در دست داشتن

III در مجاورت ناحیه I ظاهر می‌شود که این دو فاز توسط خط  $\alpha = p \frac{(p+q)e^S - 2\sqrt{pq}}{pe^S - \sqrt{pq}}$  از یکدیگر جدا می‌شوند. با کاهش  $S$  از مقدار  $\frac{1}{2} \ln \left( \frac{p}{q} \right)$  ناحیه II نیز اضافه شده که توسط خط  $\beta = q \frac{(p+q)e^S - 2\sqrt{pq}}{qe^S - \sqrt{pq}}$  از ناحیه III و توسط خط  $U(\alpha, S) = \frac{\beta}{\alpha}$  از ناحیه I تفکیک می‌شود. بدین ترتیب مطابق شکل (۱-ب) به‌ازای  $S < \frac{1}{2} \ln \left( \frac{p}{q} \right)$  سه ناحیه وجود خواهد داشت که تفکیک آنها با خطوط مشکی رنگ داده شده است که در حد  $S \rightarrow -\infty$  خطوط مشکی رنگ به سمت خطوط خط چین میل می‌کنند. برای اینکه فهم بهتری از ساختار فاز دینامیکی مدل داشته باشیم، نتایج را می‌توان در هر دو ناحیه مثبت و منفی  $S$  به‌صورت یک نمودار فاز دینامیکی سه بعدی مطابق شکل ۲ مشاهده کرد.



شکل ۲. نمودار فاز دینامیکی سه بعدی مدل با  $p = 1, q = 3$ .

با توجه به اینکه عبارت دقیقی برای بزرگترین ویژه‌مقدار هامیلتونی تعمیم یافته در نقش انرژی آزاد دینامیکی دستگاه در دست داریم، مطالعه گذار فازهای دینامیکی دستگاه از روی ساختار تحلیلی آن امکان پذیر است. برای اینکه بتوان گذار فازهای دینامیکی ولگشت ساده

احتمال اینکه ولگشت ساده در انتهای مسیر تحول دینامیکی اش در مکان  $\bar{a}$  باشد به شرط اینکه در مدت زمان مشاهده، متوسط نرخ فعالیت آن مقدار مشخص  $k$  را داشته باشد، به صورت زیر تعریف می شود:

$$P_{final}(i|k) = \frac{C_i(s)}{\sum_{j=1}^L C_j(s)} \quad 29$$

که  $C_i(s)$  مؤلفه  $i$  ام ویژه بردار راست عملگر  $\tilde{H}$  متناظر با بزرگترین ویژه مقدار آن است. این ضرائب در رابطه ۱۶ داده شده است که ضرائب  $a(z), a(z^{-1})$  در رابطه ۱۶ مطابق با رابطه ۱۸ تعریف می شوند.  $Z$  مناسب هر ناحیه نیز با کمک معادله حاکم بر  $Z$ ها رابطه ۱۷ به دست می آید. بدین ترتیب می توان معادله ۲۹ را در سه ناحیه I, II و III به صورت زیر در حد ترمودینامیک محاسبه کرد.

$$P_{final,I}(i|k) = \frac{z_1^{-2-i}\eta^{-2+i}(z_1-\eta)(1-z_1\eta)[z_1^2(1+z_1^2\zeta)\eta+e^s z_1(z_1^{2i}-z_1^2)(1+\zeta\eta^2)-z_1^{2i}(z_1^2+\zeta)\eta]}{(1-e^s)(1-z^2)(1+\zeta\eta^2)(1-\zeta)^{\delta_{i,1}}(1-\xi)^{\delta_{i,L}}} \quad 30$$

$$P_{final,II}(i|k) = \frac{z_2^{-2-(L-i+1)}\eta^{-2+(L-i+1)}(z_2-\eta^{-1})(1-z_2\eta^{-1}) \times [z_2^2(1+z_2^2\xi)\eta^{-1}+e^s z_2(z_2^{2(L-i+1)}-z_2^2)(1+\xi\eta^{-2})-z_2^{2(L-i+1)}(z_2^2+\xi)\eta^{-1}]}{(1-e^s)(1-z^2)(1+\xi\eta^{-2})(1-\zeta)^{\delta_{i,1}}(1-\xi)^{\delta_{i,L}}}$$

$$P_{final,III}(i|k) = \frac{(\eta-1)^2\eta^{-2+i}[-(i+(-2+i)\zeta)\eta+e^s(i-1)(1+\zeta\eta^2)]}{(e^s-1)(1+\zeta\eta^2)}$$

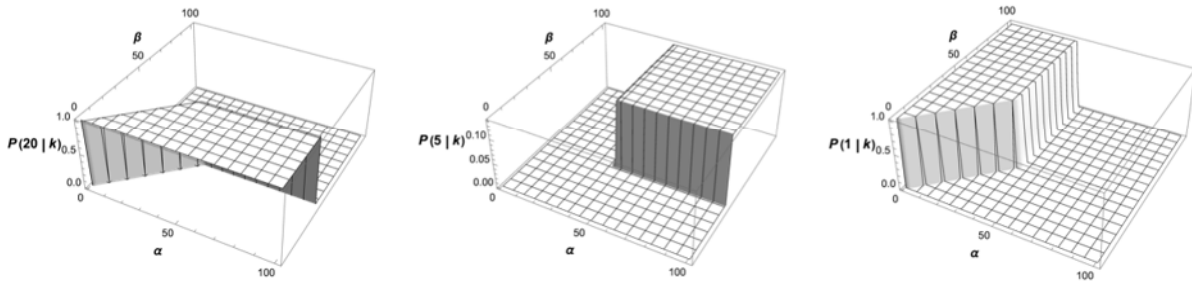
فعالیت آن در مدت زمان مشاهده، مقدار ثابت  $k$  را داشته باشد. این کمیت را نیز می توان در حد ترمودینامیک برای هر سه ناحیه به طور تحلیلی محاسبه کرد. نکته ای که در اینجا قابل ذکر است این است که رفتار ویژه بردارهای راست و چپ یا به عبارتی بردار احتمال شرطی انتها و ابتدای مسیر در دو ناحیه  $S$  مثبت و منف متفاوت است. کمیت  $P_{final}(i|k)$  به ازای

ویژه بردارهای راست و چپ هامیلتونی تعمیم یافته می توان گذار فازهای دینامیکی دستگاه را که پیش تر با مطالعه ساختار تحلیلی انرژی آزاد دینامیکی دستگاه بررسی شدند، از دیدگاه میکروسکوپی مورد مطالعه قرار داد. همان طور که در ابتدای بخش پیش اشاره شد، مطالعه فازها به ازای  $q > p$  در ناحیه  $s \geq 0$  ( $s < 0$ ) به این معناست که نتایج برای  $k < \langle k \rangle_{s=0}$  ( $k > \langle k \rangle_{s=0}$ ) معتبر است. ویژه بردارهای راست و چپ  $\tilde{H}$  متناظر با بزرگترین ویژه مقدار  $\Lambda^*(s)$  که به صورت  $\langle \Lambda^*(s) | \tilde{\Lambda}^*(s) \rangle$  نشان می دهیم، به ترتیب بردار احتمال پیکربندی نهایی و اولیه دستگاه را در مسیر دینامیکی آن، به شرط داشتن میزان نرخ فعالیت معین  $k$  (متناظر با مقدار مشخص  $S$ ) توصیف می کنند. در اینجا توانسته ایم ویژه بردار راست و چپ  $\tilde{H}$  را به طور دقیق به ازای هر  $S$  دلخواه مثبت و منفی محاسبه کنیم.

در ادامه می توان با ترانهاد کردن عملگر  $\tilde{H}$  و تعریف  $\langle \tilde{\Lambda}(s) | = \sum_{n=1}^L \tilde{C}_n \langle n |$  با کمک نهاده موج تخت به همان ترتیبی که در بخش چهارم مقاله ذکر شده است، ضرائب  $\tilde{C}_n$  را نیز محاسبه کرد. به طور مشابه  $P_{initial}(i|k) = \tilde{C}_i / \sum_{j=1}^L \tilde{C}_j$  نیز عبارتست از احتمال یافتن ولگشت ساده در جایگاه  $\bar{a}$  در ابتدای مسیر تحول دینامیکی اش به شرط آنکه متوسط نرخ

کمیت  $2, \dots, L - 1$  غیر صفر می‌باشد. برای کمیت  $P_{initial}(i|k)$  نیز رفتاری کاملاً مشابه وجود دارد. باید توجه داشت که حد  $S \rightarrow \infty$  دقیقاً متناظر با متوسط فعالیت  $k = 0$  می‌باشد؛ این یعنی ولگشت ساده از هر جایگاهی که شروع به حرکت کند، تا انتهای مسیر دینامیکی خود دقیقاً در همان جایگاه باقی می‌ماند.

در حد  $S \rightarrow \infty$  (متناظر با متوسط فعالیت  $k = 0$ ) رفتاری مطابق با شکل ۳ دارد. همان‌طور که مشاهده می‌شود این کمیت در ناحیه خاصی از صفحه متغیرها غیر صفر بوده و مرز این نواحی کاملاً تیز است. به‌نحوی که در ناحیه I این کمیت تنها به‌ازای  $i = 1$ ، در ناحیه II به‌ازای  $i = L$  و در ناحیه III به‌ازای تمامی مقادیر  $i =$



شکل ۳.  $P_{final}(i|k)$  به‌ازای  $s = 10, p = 1, q = 3$  برای شبکه‌ای به‌طول  $L = 20$ . در شکل از سمت راست به چپ به‌ترتیب  $P_{final}(1|k = 0)$  و  $P_{final}(5|k = 0)$  و  $P_{final}(20|k = 0)$  رسم شده است.

به‌طور خلاصه مطابق با جدول ۱ خواهیم داشت:

جدول ۱. احتمال یافتن ولگشت ساده در جایگاه  $i$  ام شبکه، در ابتدا و انتهای مسیر تحول دینامیکی‌اش به‌شرط داشتن متوسط فعالیت صفر (متناظر با حد  $S \rightarrow \infty$ ).

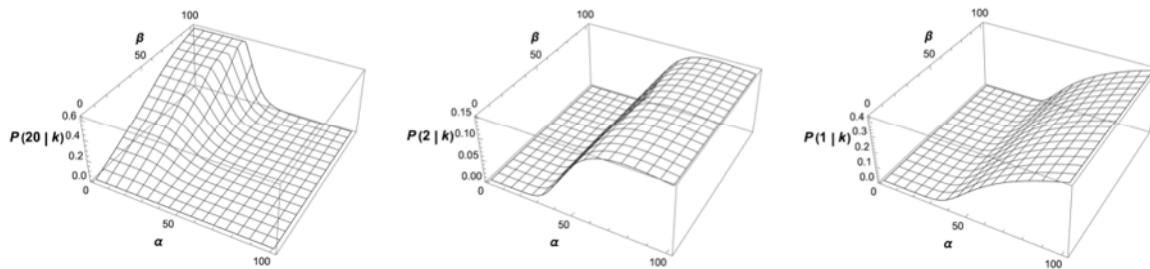
شروع و خاتمه مسیر: ابتدای شبکه	$P_{final,initial}(1 0) = 1$	ناحیه I
شروع و خاتمه مسیر: انتهای شبکه	$P_{final,initial}(L 0) = 1$	ناحیه II
شروع و خاتمه مسیر: میانه شبکه	$\sum_{i=2}^{L-1} P_{final,initial}(i 0) = 1$	ناحیه III

حدی مشابه و تا حدی متفاوت از رفتار آنها در حد  $S \rightarrow +\infty$  است. در مورد  $S \rightarrow -\infty$  این دو کمیت،

رفتار  $P_{initial}(i|k)$  و  $P_{final}(i|k)$  در حد  $S \rightarrow -\infty$  (متناظر با متوسط فعالیت بسیار زیاد) تا

ابتدا و چه در انتهای مسیر، تیز نمی‌باشد. مقادیر این کمیت‌ها از یک ناحیه به ناحیه دیگر به‌طور ناگهانی صفر نمی‌شوند، بلکه سهم آنها به تدریج افت می‌کنند. در شکل ۴ رفتار احتمال یافتن ولگشت ساده در ابتدای مسیر دینامیکی‌اش با متوسط فعالیت معین، در جایگاه‌های ۱ و ۲ و  $L$  به‌عنوان نمونه نشان داده شده است.

نه تنها به‌ازای  $i = 1$ ، بلکه به‌ازای  $i$  های مجاور آن نیز سهم غالب در ناحیه I را دارند. به‌نحوی که مقدار آنها با دور شدن از جایگاه‌های ابتدایی شبکه، رفته رفته افت می‌کند و این افت رفتار نمایی دارد. به‌طور مشابه سهم غالب در ناحیه II به  $L = i$  و چند  $i$  قبل از آن محدود شده و در ناحیه III به جایگاه‌های میانی شبکه تعلق دارد. به‌علاوه برخلاف  $S \rightarrow +\infty$  مرز نواحی برای احتمال یافتن ولگشت ساده در هر جایگاه، چه در



شکل ۴.  $P_{initial}(i|k)$  به‌ازای  $s = -10, p = 1, q = 3$  برای شبکه‌ای به‌طول  $L = 20$ . در شکل از سمت راست به چپ به‌ترتیب  $P_{initial}(1|k)$  و  $P_{initial}(2|k)$  و  $P_{initial}(20|k)$  رسم شده است.

به‌طور خلاصه مطابق با جدول ۲ خواهیم داشت :

جدول ۲. احتمال یافتن ولگشت ساده در جایگاه  $i$ ام شبکه، در ابتدا و انتهای مسیر تحول دینامیکی‌اش به‌شرط داشتن متوسط فعالیت متناظر با حد  $S \rightarrow -\infty$ .

شروع و خاتمه مسیر: جایگاه‌های ابتدایی شبکه	$P_{final,initial}(i k) \neq 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots$	ناحیه I
شروع و خاتمه مسیر: جایگاه‌های انتهایی شبکه	$P_{final,initial}(i k) \neq 0 \quad i = L, L - 1, L - 2, \dots$	ناحیه II
شروع و خاتمه مسیر: جایگاه‌های میانی شبکه		ناحیه III

$S \rightarrow \infty$  تیز نیست؟ در پاسخ به این پرسش دو ناحیه I و II را در نظر می‌گیریم. همان‌طور که پیش‌تر ذکر

حال می‌خواهیم به این پرسش پاسخ دهیم که چرا رفتار این دو کمیت در حد  $S \rightarrow -\infty$  مانند رفتار آنها در حد

### نتیجه‌گیری

در این مقاله یک مدل ساده شامل یک ولگشت ساده با حرکت بایاس روی شبکه‌ای به طول  $L$  و مرزهای انعکاسی که در آن گذار فازهای دینامیکی رخ می‌دهد، را مورد مطالعه قرار داده‌ایم. این ولگشت ساده با آهنگ  $p$  یک جایگاه به سمت راست و با آهنگ  $q$  یک جایگاه به سمت چپ می‌پرد و از مرزهای چپ و راست نیز به ترتیب با آهنگ‌های  $\alpha$  و  $\beta$  به داخل شبکه منعکس می‌گردد. فعالیت دینامیکی دستگاه را که به صورت تعداد تغییر پیکربندی دستگاه در مدت زمان مشاهده معین تعریف می‌شود، به عنوان پارامتر نظم دینامیکی در نظر گرفته‌ایم. با کمک تئوری انحراف بزرگ و مکانیک آماری مسیرها مدل را به صورت تحلیلی در حد زمان‌های طولانی مطالعه کرده‌ایم. در این راستا ویژه‌مقادیر هامیلتونی تعمیم‌یافته را با کمک نهاده موج تخت در حد زمان‌های طولانی به دست آورده‌ایم. سپس بزرگترین ویژه‌مقدار هامیلتونی تعمیم‌یافته را در دو ناحیه  $s \geq 0$  (متناظر با  $k|_{s=0} < k$ ) و  $s < 0$  (متناظر با  $k|_{s=0} > k$ ) مورد بررسی قرار داده و با توجه به بزرگترین ویژه‌مقدار وجود شش فاز دینامیکی متفاوت را پیش‌بینی کرده‌ایم. در مورد  $s \geq 0$  با توجه به مقادیر  $\alpha, \beta, s$  سه ناحیه از یکدیگر جدا می‌شوند. این سه ناحیه به طور دقیق مطالعه شده و مرز نواحی نیز به دست آمده است؛ می‌بینیم که در صفحه  $s = 0$  تنها یک ناحیه وجود دارد و به ازای  $s > 0$  ناحیه‌های II و III کنار آن ظاهر می‌شوند. در حد  $s \rightarrow \infty$  که متناظر با متوسط فعالیت صفر است، این سه ناحیه باقی می‌مانند و جدایی آنها در شکل (۱-الف) مشاهده می‌شود. در مورد  $s < 0$  نیز سه ناحیه مجزای دیگر به دست می‌آید. با بررسی ناپیوستگی‌های مشتقات بزرگترین ویژه‌مقدار هامیلتونی تعمیم‌یافته نسبت به میدان شمارنده  $s$ ، گذار فازهای مرتبه اول و دوم میان فازها

کردیم، حد  $s \rightarrow \infty$  متناظر با متوسط فعالیت صفر است و لذا با مسیرهایی مواجه می‌شویم که اگر از جایگاه اول شروع شده‌اند دقیقاً به همان جایگاه ختم می‌شوند. این در حالی است که حد  $s \rightarrow -\infty$  متناظر با متوسط فعالیت‌های بسیار زیاد بوده و خاتمه مسیر آغاز شده از جایگاه اول، لزوماً همان جایگاه نیست، بلکه می‌تواند به جایگاه‌های مجاور آن نیز گسترش یابد. در اینجا می‌توان گذار فازهای پیوسته و ناپیوسته را در دو ناحیه  $s > 0$  و  $s < 0$  با توجه به مسیرهای متناظر با فازهای دینامیکی دستگاه تفسیر کرد.

در ناحیه  $s > 0$  گذار فاز مرتبه اول (پیوسته) بین دو ناحیه I و II رخ می‌دهد و این بدان معناست که متوسط فعالیت ولگشت ساده در ناحیه I از مسیرهای دینامیکی‌ای نشأت می‌گیرد که ولگشت ساده در ابتدا و انتهای آنها در جایگاه اول قرار دارد. در حالی که در ناحیه II، متوسط فعالیت ولگشت ساده از مسیرهایی که ولگشت ساده در ابتدا و انتهای آن مسیرها در جایگاه  $L$  ام قرار دارد، تولید می‌شود. از طرف دیگر دو گذار فاز مرتبه دوم (ناپیوسته) بین نواحی (I و III) و (II و III) رخ می‌دهد. در گذار از ناحیه III به I یا II متوسط فعالیت ولگشت ساده از مجموعه مسیرهای متفاوتی ناشی می‌شود به طوری که در ناحیه III مجموعه مسیرهایی دارای اهمیت می‌باشند که پیکربندی اولیه و نهایی دستگاه مربوط به حضور ولگشت ساده در قسمت میانی شبکه است. این در حالی است که در نواحی I و II مجموعه مسیرهایی که پیکربندی اولیه و نهایی دستگاه مربوط به حالت‌هایی است که ولگشت ساده در جایگاه اول یا در جایگاه  $L$  ام قرار دارد، متوسط فعالیت ولگشت ساده را فراهم می‌کنند. بدین ترتیب می‌توان گذار فازهای پیوسته و ناپیوسته را برای ناحیه  $s < 0$  نیز مطابق با جدول ۲ تفسیر کرد.

کمیت‌ها از یک ناحیه به ناحیه دیگر به‌طور ناگهانی صفر نمی‌شوند، بلکه سهم آنها به تدریج افت می‌کنند. برای توضیح این تفاوت می‌توان حد  $S \rightarrow \infty$  و  $S \rightarrow -\infty$  را در دو ناحیه I و II در نظر گرفت؛ حد  $S \rightarrow \infty$  متناظر با متوسط فعالیت صفر است و لذا در ناحیه I با مسیرهای دینامیکی ای مواجه می‌شویم که اگر از جایگاه اول شروع شده‌اند دقیقاً به همان جایگاه ختم می‌شوند. این یعنی ولگشت ساده از هر جایگاهی که شروع به حرکت کند، تا انتهای مسیر دینامیکی خود دقیقاً در همان جایگاه باقی می‌ماند. این در حالی است که حد  $S \rightarrow -\infty$  متناظر با متوسط فعالیت‌های بسیار زیاد بوده و خاتمه مسیر آغاز شده از جایگاه اول، لزوماً همان جایگاه نیست، بلکه می‌تواند به جایگاه‌های مجاور آن نیز گسترش یابد. در ادامه گذار فازهای پیوسته و ناپیوسته را در دو ناحیه  $S > 0$  و  $S < 0$  با توجه به مسیرهای متناظر با فازهای دینامیکی دستگاه تفسیر کرده‌ایم. در این راستا تمامی نتایج تحلیلی با نتایج عددی به دست آمده از قطری کردن عددی هامیلتونی تعمیم یافته تأیید شده است.

مشاهده و مقادیر بحرانی پارامتر کنترل  $S$  در نقاط گذارها مشخص شده است. در مرز نواحی I و II گذار فاز مرتبه اول (ناپیوسته) به‌ازای  $S = S_c$  و در مرز نواحی I و III و نواحی II و III گذار فازهای مرتبه دوم (پیوسته) به ترتیب در  $S_\alpha$  و  $S_\beta$  مشاهده می‌شود. به‌منظور تفسیر میکروسکوپی رفتار ولگشت ساده در هر فاز دینامیکی و همچنین تفسیر گذار فازهای دینامیکی مرتبه اول و دوم در این مدل، ویژه‌بردارهای راست و چپ هامیلتونی تعمیم یافته متناظر با بزرگترین ویژه‌مقدار را محاسبه کرده‌ایم. این ویژه‌بردارهای راست و چپ به ترتیب بردار احتمال پیکربندی نهایی و اولیه دستگاه را در مسیر دینامیکی آن، به شرط داشتن میزان نرخ فعالیت معین  $k$  (متناظر با مقدار مشخص  $S$ ) توصیف می‌کنند. نکته‌ای که در اینجا قابل ذکر است این است که رفتار ویژه‌بردارهای راست و چپ یا به عبارتی بردار احتمال شرطی انتها و ابتدای مسیر در دو ناحیه  $S$  مثبت و منفی متفاوت است. در ناحیه  $S$  مثبت این دو کمیت در ناحیه خاصی از صفحه متغیرهای  $\beta, \alpha$  غیر صفر بوده و مرز این نواحی کاملاً تیز است؛ در حالی که در ناحیه  $S$  منفی مقادیر این

## مرجع‌ها

- current statistics in a simple driven diffusive systems, Physical Review E 87 (2013) 032115.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.032115>
- [4] R.J. Harris, A. Rakos, G.M. Schutz, Current fluctuations in the zero-range process with open boundaries, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, P08003 (2005). [10.1088/1742-5468/2005/08/P08003](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2005/08/P08003)
- [5] V. Lecomte, C. Appert-Rolland, F. van Wijland, Thermodynamic formalism for

- [1] T. Bodineau, B. Derrida, Current Fluctuations in nonequilibrium diffusive systems: An additivity principle, Physical Review Letters 92 (2004) 180601.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.180601>
- [2] T. Bodineau, B. Derrida, Distribution of current in nonequilibrium diffusive systems and phase transitions, Physical Review E 72 (2005) 066110.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.066110>
- [3] C.P. Espigares, P.L. Garrido, P.I. Hurtado, Dynamical phase transition for

- Reports 478 (2009) 1-69.  
[10.1016/j.physrep.2009.05.002](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2009.05.002)
- [13] A. Lazarescu, Ph.D. thesis, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI (2013). arXiv:1311.7370
- [14] P. Torkaman, F.H. Jafarpour, Rare-event trajectory ensemble approach to study dynamical phase transitions in the zero temperature Glauber model, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, (2015) P01007.  
<https://doi.org/10.1088/1742-5468/2015/01/P01007>
- [15] J. Kurchan, Fluctuation theorem for stochastic dynamics, *Journal of Physics. A: Mathematical and General* 31 (1998) 3719.  
<https://doi.org/10.1088/0305-4470/31/16/003>
- [16] A. Rakos, R.J. Harris, On the range of validity of the fluctuation theorem for stochastic Markovian dynamics, *Journal of Statistical Mechanics; Theory and Experiment*, (2008) P05005. [10.1088/1742-5468/2008/05/P05005](https://doi.org/10.1088/1742-5468/2008/05/P05005)
- [17] J.L. Lebowitz, H. Spohn, A Gallavotti-Cohen-Type symmetry in the large deviation functional for stochastic dynamics, *Journal of Statistical Physics* 95 (1999) 333.  
<https://doi.org/10.1023/A:1004589714161>
- [18] R.S. Ellis, Large deviations for a general class of random vectors, *Annals of Probability* 12 (1984) 1-12.  
<https://doi.org/10.1214/aop/1176993370>
- [19] R.T. Rockefeller. *Convex Analysis*. Princeton University Press, Princeton, (1970).
- [20] G.M. Schutz, *Phase transitions and critical phenomena Academic*, London, 19 (2001) 3.
- systems with Markov dynamics, *Journal of Statistical Physics* 127 (2007) 51-106.  
<https://doi.org/10.1007/s10955-006-9254-0>
- [6] D. Ruelle, *Thermodynamic Formalism* (Addison-Wesley, Reading, (1978).
- [7] J.P. Garrahan, R.L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, F. van Wijland, Dynamical first-order phase transition in kinetically constrained models of glasses, *Physical Review Letters* 98 (2007) 195702.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.195702>
- [8] L.O. Hedges, R.L. Jack, J.P. Garrahan, and D. Chandler, Dynamical order-disorder in atomistic models of structural glass formers, *Science* 323 (2009) 1309-1313.  
<https://doi.org/10.1126/science.1166665>
- [9] A.S.J.S. Mey, P.L. Geissler, J.P. Garrahan, Rare-event trajectory ensemble analysis reveals metastable dynamical phases in lattice proteins, *Physical Review E* 89 (2014) 032109.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevE.89.032109>
- [10] R.L. Jack, P. Sollich, Large deviations and ensembles of trajectories in stochastic models, *Progress of Theoretical Physics Supplement* 184 (2010) 304-317.  
<https://doi.org/10.1143/PTPS.184.304>
- [11] V. Lecomte, J.P. Garrahan, F. van Wijland, Inactive dynamical phase of a symmetric exclusion process on a ring, *J. Phys. A: Math. Theor* 45 (2012) 175001.  
[10.1088/1751-8113/45/17/175001](https://doi.org/10.1088/1751-8113/45/17/175001)
- [12] H. Touchette, *The large deviation approach to statistical mechanics*, *Physics*



[21] M. Arabsalmani, A. Aghamohammadi, Phase transitions in systems possessing shock solutions, *Physical Review E* 74 (2006) 011107. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.74.011107>

[22] N. Crampe, E. Ragoucy, D. Simon, Matrix coordinate Bethe Ansatz: applications to XXZ and ASEP models, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 44 (2011) 405003. <https://doi.org/10.1088/1751-8113/44/40/405003>