

Forschungsmodul: Komplexe Systeme

Bericht zur Vorlesung vom 24./31. Jan. 2008 von Jan-Philip Gehrcke

Der Exklusionsprozess

Varianten

Der Exklusionsprozess entspricht einem Diffusionsprozess auf einem Gitter, wobei jeder Platz nur von einem Teilchen besetzt oder unbesetzt sein darf. Teilchen können zu ihren Nachbarplätzen wechseln. Diese Sprünge erfolgen mit vorgegebenen Raten. Ist der Zielplatz besetzt, findet ein Sprung nicht statt. Diese Wechselwirkung unterscheidet den Exklusionsprozess vom Random Walk.

Prinzipiell unterscheidet man zwischen drei Exklusionsprozess-Klassen, die im Folgenden anhand eines eindimensionalen Gitters, also einer Kette, beschrieben werden sollen.

- **symmetrischer Exklusionsprozess (SEP):**

Hier entspricht die Rate λ_l (Sprung nach links) der Rate λ_r (Sprung nach rechts): $\lambda_r = \lambda_l = \lambda$

- **antisymmetrischer Exklusionsprozess (ASEP):**

Hier ist ein Sprung in eine Richtung wahrscheinlicher, als in die andere Richtung: $\lambda_r \neq \lambda_l$

- **total antisymmetrischer Exklusionsprozess (TASEP):**

Eine der beiden Raten λ_l und λ_r ist null, sodass Teilchen nur in eine Richtung wandern können.

Möchte man den Exklusionsprozess simulieren bzw. ein mathematisches Modell entwerfen, muss man sich bei einem endlichen System auf die Randbedingungen festlegen. Anhand der eindimensionalen Kette werden nun die drei möglichen Randbedingungen vorgestellt.

- **periodische Randbedingungen:**

Die Kette bildet einen Ring. Das bedeutet, dass Teilchen, die am linken (rechten) Ende “herausfallen” würden, am rechten (linken) Ende wieder “hereinkommen”. Die Teilchenzahl auf der Kette ist somit erhalten.

- **geschlossene Randbedingungen:**

Ein “Herausfallen” ist nicht möglich; am linken (rechten) Ende können die Teilchen nicht mehr nach links (rechts) springen. Die Teilchenzahl auf der Kette ist somit erhalten.

- **offene Randbedingungen:**

An den Enden der Kette befinden sich Teilchenreservoirs. Aus diesen können (mit besonderen Raten) Teilchen auf die Kette hüpfen. Mit ebenfalls eigenen Raten ist auch ein Verlassen der Kette erlaubt. Die Teilchenzahl auf der Kette ist nicht erhalten.

Beim letzten Fall (offene Randbedingungen) können die Raten so gewählt sein, dass ein effektiver Strom auf der Kette entsteht, der Teilchen von einem Reservoir ins andere führt. Prinzipiell beschreibt dies ein System, welches sich nicht im thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Beispielhaft seien hier zwei Körper mit unterschiedlichen Temperaturen genannt, die mit einer Wärmebrücke verbunden sind.

Konfigurationen, Zustandsraum

Eine Kette mit L Plätzen, die jeweils besetzt/unbesetzt sein können (2 Möglichkeiten pro Platz), kann prinzipiell in 2^L verschiedenen Zuständen s vorliegen. Ein Zustand s beschreibt die mikroskopische Konfiguration des Systems (der Kette).

Somit ist ein Zustandsraum Ω definierbar; eine Menge, die alle möglichen (Mikro-)Zustände s enthält. Innerhalb des Zustandsraumes springt der Prozess in nicht vorhersehbarer Weise. Die Mächtigkeit $|\Omega|$ des Zustandsraumes entspricht der Anzahl der möglichen Zustände. Für eine Kette mit L Plätzen gilt also:

$$|\Omega| = 2^L$$

Bei periodischen oder abgeschlossenen Randbedingungen (Teilchenzahl erhalten), kann das System nicht jeden möglichen Zustand aus Ω annehmen. Es verbleibt in demjenigen "Sektor" des Zustandsraumes, in dem die Teilchenzahl konstant ist. Für die feste Teilchenzahl N sei dieser Sektor Ω_N . Die Anzahl der möglichen Zustände bei konstantem N , also die Mächtigkeit $|\Omega_N|$, ist die Anzahl der Möglichkeiten N Teilchen auf L Plätze zu verteilen:

$$|\Omega_N| = \binom{L}{N} \text{ für } 0 \leq N \leq L$$

Statistisches Ensemble des Prozesses

Das statistische Ensemble beschreibt anschaulich eine große Menge Repräsentanten (Kopien) desselben Systems. Der Prozess hat bei allen Repräsentanten gleichzeitig begonnen. Wählt man nun zur Zeit t einen dieser Repräsentanten zufällig aus, so ist dieser mit der Wahrscheinlichkeit $P_t(s)$ im Zustand $s \in \Omega$. Für die Entwicklung eines mathematischen Modells zum Exklusionspro-

zess bietet es sich an dieser Stelle an, einen Vektor $|P_t\rangle$ zu definieren, der die Wahrscheinlichkeiten $P_t(s)$ für jeden Zustand $s \in \Omega$ zu einem Zeitpunkt t zusammenfasst. Der Vektor $|P_t\rangle$ entstammt also einem "Wahrscheinlichkeitsraum" mit $|\Omega|$ Komponenten: $|P_t\rangle \in \mathbb{R}^{|\Omega|}$. Da die Komponenten Wahrscheinlichkeiten angeben, gilt: $P_t(s) \in [0,1]$

Die (Spalten-)Vektoren $|P_t\rangle$ füllen dabei nicht den gesamten Raum $\mathbb{R}^{|\Omega|}$ aus. Schließlich muss für die Komponentensumme (Wahrscheinlichkeitensumme) gelten:

$$\sum_{s \in \Omega} P_t(s) = 1 \quad \forall t$$

Jeder der Basisvektoren $|s\rangle$ des $\mathbb{R}^{|\Omega|}$ entspricht genau einem Zustand s . Dessen Wahrscheinlichkeitskomponente ist dann 1; die restlichen 0. Beispiel:

$$|s\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix}$$

Im zugehörigen Dualraum der Funktionale seien $\langle s|$ Zeilenvektoren. Beispiel:

$$\langle s| = (0, 1, \dots, 0)$$

Durch diese Notation lassen sich einige Forderungen und Zusammenhänge einfach ausdrücken (mit "Zeile x Spalte" als Skalarprodukt):

- Orthogonalitätsrelation: $\langle s|s'\rangle = \delta_{ss'}$
- Selektion einer Komponente: $P_t(s) = \langle s|P_t\rangle$
- Definition: $\langle 1| \equiv (1 \ 1 \dots 1) = \sum_{s \in \Omega} \langle s|$
- Normierung: $\langle 1|P_t\rangle = \sum_{s \in \Omega} \langle s|P_t\rangle = 1$

Dynamik und Mastergleichung

Um die Dynamik des Prozesses (im Zustandsraum) zu beschreiben, werden die Raten $w_{i \rightarrow j}$ benötigt, die die Wahrscheinlichkeiten $p_{i \rightarrow j}$ bestimmen, dass das System innerhalb des infinitesimalen Zeitschritts dt vom Zustand i in den Zustand j wechselt:

$$p_{i \rightarrow j} = dt w_{i \rightarrow j}$$

Mit der Konvention, dass die Übergangswahrscheinlichkeit $w_{i \rightarrow i}$ in den eigenen Zustand 0 ist, lässt sich die Zeitentwicklung der Besetzungswahrscheinlichkeit $P_t(s)$ des Zustands s mit folgender DGL (Mastergleichung) beschreiben:

$$\dot{P}_t(s) = + \sum_{s' \in \Omega} P_t(s') w_{s' \rightarrow s} - P_t(s) \sum_{s' \in \Omega} w_{s \rightarrow s'} \quad \text{mit} \quad \sum_{s \in \Omega} P_t(s) = 1 \quad \forall t$$

Der erste Summand beinhaltet die Gewinnterme (Übergänge hin zum Zustand s); der zweite Summand beinhaltet die Verlustterme (Übergänge weg vom Zustand s)

Mit obiger Gleichung ist die Wahrscheinlichkeitszeitentwicklung für genau einen Zustand beschrieben. Die zeitliche Entwicklung für alle Zustände s , also für den Vektor $|P_t\rangle$, lässt sich mithilfe einer Transfermatrix (LIOUVILLE-Operator) ausdrücken:

$$|\dot{P}_t\rangle = -L|P_t\rangle$$

Dabei ist L eine $2^L \times 2^L$ - Matrix, die im Wesentlichen aus den Übergangsraten besteht. Wenn man von dieser Gleichung wieder auf diejenige für einen einzelnen Zustand transformiert, ergibt sich, wie die Matrixelemente genau berechnet werden müssen. Dazu wird zuerst der Vektor $\langle s|$ von links an die Gleichung multipliziert und die Projektorsumme als Einselement eingefügt:

$$\sum_{s' \in \Omega} |s'\rangle \langle s'| = 1$$

$$\rightarrow \frac{d}{dt} \langle s | P_t \rangle = - \sum_{s' \in \Omega} \langle s | L | s' \rangle \langle s' | P_t \rangle$$

Um daraus die Zeitentwicklungsgleichung für genau einen Zustand wiederherzustellen, muss gelten (mit $L_{s,s'} = \langle s | L | s' \rangle$):

$$L_{s,s'} = -w_{s' \rightarrow s} + \delta_{s,s'} \sum_{s'' \in \Omega} w_{s \rightarrow s''}$$

Damit die Summe aller Wahrscheinlichkeiten zu jeder Zeit konstant ist, müssen sich alle durch den LIOUVILLE-Operator hervorgerufenen Änderungen in den Wahrscheinlichkeiten $P_t(s)$ immer genau zu null wegheben. Dann "erhält L die Wahrscheinlichkeit". Dies ist der Fall, wenn die Spaltensummen in L null sind, wie im Folgenden kurz gezeigt wird:

Ansatz: Die Änderung der aufsummierten Wahrscheinlichkeiten $P_t(s)$ soll null sein:

$$\langle 1 | \frac{d}{dt} P_t \rangle = 0$$

Aus der Mastergleichung mit LIOUVILLE-Operator ergibt sich:

$$\langle 1 | -L | P_t \rangle = 0$$

Das bedeutet, dass das Funktional $\langle 1 | -L$ dem Nullzeilenvektor entsprechen muss:

$$\langle 1 | -L = (0, 0, \dots, 0)$$

Dies wiederum bedeutet, dass jede Spalte des LIOUVILLE-Operators in Summe 0 ergeben muss.

Zerlegung nach Eigenmoden und Relaxation

Die formale Lösung der Mastergleichung lautet:

$$|P_t\rangle = e^{-Lt} |P_0\rangle$$

Dabei ist $|P_0\rangle$ der Anfangszustand des statistischen Ensembles.

Es kann einen oder mehrere "Grundzustände" geben, in den der Prozess mit der Zeit relaxiert. Für einen solchen stationären Zustand $|P_{stat}\rangle$ ist die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeitsverteilung null; es muss also nach der Mastergleichung gelten:

$$L|P_{stat}\rangle = 0$$

Die Eigenwerte λ des LIOUVILLE-Operators sind niemals negativ. Jedem Eigenwert ist eine Relaxationsmode zugeordnet. Mit der Ausnahme $\lambda = 0$ relaxieren alle Moden exponentiell in einen stationären Zustand, wie kurz gezeigt wird:

Die Anfangsverteilung als Linearkombination aus Eigenmoden $|\Psi_n\rangle$ in die formale Lösung eingesetzt ergibt:

$$|P_0\rangle = \sum_n c_n |\Psi_n\rangle \rightarrow |P_t\rangle = e^{-Lt} \sum_n c_n |\Psi_n\rangle$$

Wenn das Eigenwertproblem für L vollständig gelöst ist, kann L im Exponentialoperator durch den zugehörigen Eigenwert λ_n ersetzt werden:

$$|P_t\rangle = \sum_n c_n e^{-\lambda_n t} |\Psi_n\rangle$$

$|P_t\rangle$ ist also eine Linearkombination aus exponentiell relaxierenden Eigenmoden.

Bilden des LIOUVILLE-Operators aus Tensorprodukten

Um die verschiedenen möglichen Zustände eines Exklusionsprozesses mathematisch darstellen zu können, soll ein Raum geschaffen werden, der sich mithilfe von Tensorprodukten aus dem kleinsten Element herleiten lässt; der elementaren Basis für einen Gitterplatz:

$$\text{Platz frei: } |\emptyset\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \text{Platz besetzt: } |A\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Damit lässt sich nun die Basis für mehrere, z.B. 2 Gitterplätze durch Tensorprodukte bilden:

$$|\emptyset\emptyset\rangle = |\emptyset\rangle \otimes |\emptyset\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \dots; |AA\rangle = |A\rangle \otimes |A\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Der voll besetzte Zustand einer Kette mit N Plätzen würde also lauten:

$$|AA\dots A\rangle = |A\rangle \otimes \dots \otimes |A\rangle \equiv |A\rangle^{\otimes N}$$

Der entsprechende Zustandsraum ist der $\mathbb{R}^{\otimes 2N}$.

Eine Verteilung, bei der jeder Gitterplatz unabhängig mit der Wahrscheinlichkeit p besetzt ist, ist demnach folgendermaßen auszudrücken:

$$|P\rangle = (p|A\rangle + (1-p)|\emptyset\rangle)^{\otimes N}$$

Der kleinste sinnvolle LIOUVILLE-Operator ist derjenige für 2 Gitterplätze. Für den asymmetrischen Exklusionsprozess (mit den Raten λ_r und λ_l) mit geschlossenen Randbedingungen ist dieser $L^{(2)}$ einfach und argumentativ zu bilden. Er ist im Folgenden also bekannt.

Aus ihm lässt sich $L^{(N)}$, der LIOUVILLE-Operator für N Plätze auf der Kette, berechnen:

$$L^{(N)} = \sum_{k=1}^{N-1} L_{k,k+1} \quad \text{mit} \quad L_{k,k+1} = 1^{\otimes k-1} \otimes L^{(2)} \otimes 1^{\otimes N-k-1}$$

Konstruktion von Observablen

Mithilfe des Projektionsoperators $X = |A\rangle\langle A|$ auf einen besetzten Platz lässt sich eine Messgröße konstruieren: Die Teilchendichte $\rho_i(t)$ am Platz i zur Zeit t . Wenn die Summe über die Wahrscheinlichkeitsverteilung 1 ist, lässt sie sich folgendermaßen berechnen (sonst muss sie noch normiert werden):

$$\rho_i(t) = \langle 1 | X_i | P_t \rangle \quad \text{mit} \quad X_i = 1^{\otimes i-1} \otimes X \otimes 1^{\otimes N-i}$$

Korrelationsfunktion

Die 2-Punkt-Funktion $C_{ij}(t)$ gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass Platz i und j zur gleichen Zeit t besetzt sind. Sie berechnet sich zu:

$$C_{ij}(t) = \langle 1 | X_i X_j | P_t \rangle$$

Der sogenannte "connected part" beschreibt, ob zwischen zwei Plätzen ein außergewöhnlicher Zusammenhang herrscht, der vom Standard abweicht. Er berechnet sich daher aus der Differenz zwischen Korrelation und Standard:

$$C_{ij}^{conn}(t) = \langle 1 | X_i X_j | P_t \rangle - \langle 1 | X_i | P_t \rangle \langle 1 | X_j | P_t \rangle$$

Korrelationsfreie ("connected part" - freie) Wahrscheinlichkeitsverteilungen sind Produktzustände, die sich faktorisieren lassen:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\Psi_N\rangle$$

Ein Produktzustand heißt homogen, wenn alle Faktoren gleich sind:

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle^{\otimes N}$$

Parallelen des Exklusionsprozesses zu Spins

Die Eigenwerte des LIOUVILLE-Operators sind größtenteils entartet. Die algebraische Vielfachheit eines jeden Eigenwertes ist vergleichbar mit Singlett- / Triplet- / ... -Zuständen bei Spins: Sie beträgt 1, 3, 5, 7,

Desweiteren besteht folgender Zusammenhang zwischen dem $L^{(2)}$ und den drei Paulimatrizen:

$$L^{(2)} = \frac{-(\sigma^x \otimes \sigma^x + \sigma^y \otimes \sigma^y + \sigma^z \otimes \sigma^z - 1 \otimes 1)}{4}$$