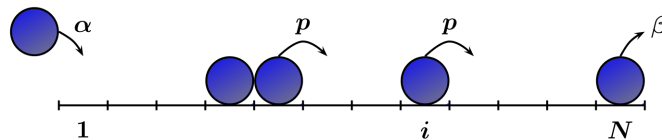


Prof. Holger Stark (Sprechstunde: Fr 11:30-12:30 in EW 709)
 Maximilian Schmitt (Sprechstunde: Mo 14:00-15:00 in EW 708)

11. Übungsblatt – Statistische Physik des Nichtgleichgewichts

Abgabe/Vorrechnen: Mi. 03.07.2013 in der Übung (10:15 EW 731)

M Aufgabe 33: TASEP: Mastergleichung und Korrelationen



Der *Totally Asymmetric Simple Exclusion Process* (TASEP) ist eine einfache Realisierung eines getriebenen Nicht-Gleichgewicht-Systems. Das System besteht aus einem 1D Gitter, mit N Gitterplätzen. Auf jedem Gitterplatz i kann entweder ein Teilchen $n_i = 1$ oder kein Teilchen $n_i = 0$ sitzen. Teilchen springen mit der Wahrscheinlichkeit p von Platz i zum nächsten Gitterplatz $i + 1$, es sei denn $i + 1$ ist bereits belegt. Am linken Rand bei $i = 1$ werden Teilchen dem System mit der Rate $0 \leq \alpha \leq 1$ hinzugefügt (es sei denn der Platz ist belegt) und am rechten Rand verlassen Teilchen das Gitter mit der Rate $0 \leq \beta \leq 1$.

Die Mastergleichung für die mittlere Dichte am Platz i lautet:

$$\frac{d\langle n_i \rangle}{dt} = \langle p n_{i-1} (1 - n_i) - p n_i (1 - n_{i+1}) \rangle .$$

- (a) Wie lautet die Mastergleichung für $\langle n_1 \rangle$ bzw. $\langle n_N \rangle$?
- (b) Wie lautet die Mastergleichung für $\langle n_i n_{i+1} \rangle$?

S Aufgabe 34 (5 Punkte): TASEP: Phasendiagramm in der Molekularfeldnäherung

Im Folgenden soll die *Molekularfeldnäherung* $\langle n_i n_j \rangle = \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle \equiv \rho_i \rho_j$ verwendet werden. Ferner gilt $p = 1$.

- (a) Identifizieren Sie damit den Teilchenstrom $J_{i,i+1}$, der durch das Gitter von i nach $i + 1$ fließt und den Teilchenstrom $J_{i-1,i}$, der von $i - 1$ nach i fließt. Was gilt im stationären Fall für den Teilchenstrom?

Im Folgenden soll weiter der stationäre Fall betrachtet werden.

- (b) Finden Sie eine Rekursionsformel für ρ_{i+1} als Funktion von ρ_i und bestimmen Sie deren Fixpunkte ρ_- und ρ_+ (mit $\rho_- < \rho_+$) sowie deren Stabilität. Zeigen Sie, dass $\rho_- + \rho_+ = 1$. Fertigen Sie eine Skizze von der Rekursionsformel an (ρ_{i+1} über ρ_i). Welchen Einfluss hat der Teilchenstrom auf die Fixpunkte?
- (c) Zeigen Sie mit Hilfe von Aufgabe 33 (a), dass $\rho_1 = \alpha$ und $\rho_N = 1 - \beta$. Nehmen Sie dazu an, dass $\rho_1 \approx \rho_2$ und $\rho_N \approx \rho_{N-1}$.
- (d) Zeigen Sie, dass der TASEP drei Phasen besitzt:
 - (i) Eine Niedrigdichtephase mit $J_{ND} = (1 - \alpha)\alpha$,
 - (ii) Eine Hochdichtephase mit $J_{HD} = (1 - \beta)\beta$,
 - (iii) Eine Phase maximalen Stroms mit $J_{MAX} = 1/4$.

Hinweis: Verwenden die Beziehungen $\rho_+ > \rho_-$ und $\rho_- + \rho_+ = 1$.

Fertigen Sie ein Phasendiagramm im α, β Phasenraum an und zeichnen Sie die Phasengrenzen zwischen den drei Phasen. Welche Phasenübergänge gibt es in dem System?

11. Übung SP WS12

S Aufgabe 35 (5 Punkte): TASEP: Monte-Carlo Simulation

Simulieren Sie den TASEP am Computer (z.B. mit C). Verwenden Sie folgende Monte Carlo Methode mit sequentielltem Zeitupdate:

Gegeben sei ein Gitter mit N Gitterplätzen und den Raten α und β . (Es gilt weiterhin $p = 1$)
Wähle zufällig ein $i \in [0, N]$.

1. Fall $i = 0$: Ist $\rho_1 = 1$, so breche ab. Sonst ziehe eine Zufallszahl $r \in [0, 1]$ und vergleiche sie mit α . Ist $r < \alpha$, so füge ein Teilchen bei $i = 1$ hinzu. Sonst breche ab.
2. Fall $i = N$: Ist $\rho_N = 0$, so breche ab. Sonst ziehe eine Zufallszahl $r \in [0, 1]$ und vergleiche sie mit β . Ist $r < \beta$, so entferne ein Teilchen bei $i = N$. Sonst breche ab.
3. Fall $0 < i < N$: Ist $\rho_i = 1$ und $\rho_{i+1} = 0$, so führe einen Sprungprozess aus. Sonst breche ab.

Wiederhole dieses N mal.

Das ist dann ein Monte Carlo Zeitschritt.

Verwenden Sie $N = 100$ und als Anfangsbedingung eine zufällige Belegung des Gitters und simulieren Sie die Fälle

- (i) $\alpha = 0.2, \beta = 0.8$,
- (ii) $\alpha = 0.8, \beta = 0.2$,
- (iii) $\alpha = 0.8, \beta = 0.8$,
- (iv) $\alpha = 0.2, \beta = 0.2$.

Messen Sie die stationäre mittlere Dichte im Gitter und Vergleichen Sie das Ergebnis mit den Resultaten aus Aufgabe 34. Plotten Sie das Dichteprofil (gemittelt über die Zeit) für die vier Fälle. Geben Sie den Quellcode mit ab.