

Bachelorarbeit

**Skalierungsverhalten von
Grenzflächenfluktuationen zwischen
selbstorganisierten Phasen maximalen
Stroms im stochastischen Transport
wechselwirkender Teilchen**

Sören Schweers
Universität Osnabrück

Erstprüfer: Prof. Dr. Philipp Maaß
Zweitprüfer: M. Sc. Marco Bosi

25. September 2020

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Fluktuationen der Grenzfläche zwischen zwei Phasen extremalen Stroms in einem sogenannten „totally asymmetric simple exclusion process“ (TASEP) mit repulsiver Nächster-Nachbar-Wechselwirkung untersucht. Dabei werden für große Systemlängen L Zeiten mit verschiedenem Wachstumsverhalten gefunden. Weiterhin wird ein Ansatz für eine analytische Beschreibung des Dichteprofiles des betrachteten TASEPs hergeleitet. Zusätzlich wird eine Langevin-Gleichung sowohl unter Verwendung theoretischer Überlegungen als auch durch Auswertung von numerischen Simulationen hergeleitet, die einen Ausgangspunkt für die Beschreibung der Bewegung der Grenzfläche für mittlere und große Zeiten t darstellt.

Abstract

In this thesis interface fluctuations between maximal current phases inside a so-called “totally asymmetric simple exclusion process” (TASEP) with a repulsive next neighbour interaction are being analysed and discussed. Time intervals with different growth behaviours can be found for large system lengths L . Furthermore, an analytical description of the density profile’s time evolution is derived. Additionally, a Langevin-equation that can be used as a basis for the description of the interface movement for medium and large times t is found using theoretical considerations as well as analyzations of numerical data.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Verschiedene getriebene Systeme mit stochastischem Teilchen-transport	1
1.1.1	ASEP	1
1.1.2	BASEP	1
1.1.3	TASEP	2
2	TASEP mit repulsiver Nächster-Nachbar-Wechselwirkung	2
2.1	Aufbau und Besetzung des Gitters	2
2.2	Dynamik	2
2.3	Reservoir	3
3	Phasen im TASEP mit repulsiver Nächster-Nachbar-Wechselwirkung	4
4	Dichteprofil	6
4.1	Bestimmung des Dichteprofiles	6
4.2	Begrenzte Nutzbarkeit dieser Bestimmungsmethode	7
5	Bestimmung der Grenzflächenbreite	7
5.1	Geistteilchen	8
5.2	Definition der Grenzflächenbreite	8
6	Untersuchung der zeitlichen Entwicklung der Grenzflächenverbreiterung	9
6.1	Ursprüngliche Annahme	9
6.2	Neue Simulationen	9
7	Analytischer Ansatz für das Dichteprofil $\rho(x, t)$	15
7.1	Ausgangspunkt: ASEP	16
7.2	Übertragung auf wechselwirkenden TASEP	16
7.3	Lösung der Gleichung und Bestimmung der freien Parameter	17
7.4	Überprüfung der Skalierung von $w_{av}(t, L)$	21
8	Erklärungsansätze für das Verhalten der Grenzflächenbreite	21
8.1	Vergleich mit Simulationen	24
8.2	Integration der Langevin-Gleichung	25
9	Zusammenfassung	26
	Literaturverzeichnis	28

1 Einführung

Im Folgenden wird das Verhalten eines TASEPs (totally asymmetric simple exclusion process) untersucht. Dieser kann als Modellsystem für verschiedene in der Natur sowie in weiteren Bereichen vorkommende Transportphänomene verwendet werden. Dazu gehören z. B. in der Biologie der Transport von Motorproteinen entlang von Aktinfilamenten, die Proteinsynthese vermittelnde Ribosomen und die Diffusion von Ionen durch Zellmembranen. In der Physik kann der Transport von Ladungen in Solarzellen oder die Bewegung von Elektronen in molekularen Drähten beschrieben werden [3, 6]. Weiterhin können Alltagsphänomene wie Staus im Straßenverkehr simuliert werden [8].

Die Untersuchung von TASEPs oder ASEPs (asymmetric simple exclusion processes) ermöglicht auch grundlegende Phänomene von Systemen im Nichtgleichgewicht zu untersuchen. Besonders interessant sind dabei eindimensionale Systeme, da es bei diesen vergleichsweise einfach ist, auch eine analytische Beschreibung der gefundenen Phänomene zu finden [6].

1.1 Verschiedene getriebene Systeme mit stochastischem Teilchentransport

Bei einem ASEP und ähnlichen Systemen handelt es sich um getriebene Gittergase. Verschiedene Varianten dieser Gittergase werden hier kurz vorgestellt.

1.1.1 ASEP

Dem ASEP liegt strukturell ein eindimensionales Gitter mit einer Anzahl L von Gitterplätzen zugrunde. Häufig werden periodische Randbedingungen angenommen. Diese Gitterplätze können von maximal einem Teilchen zur gleichen Zeit besetzt werden. Weiterhin werden Sprungraten Γ_L und Γ_R festgelegt. Dies sind Raten, die beschreiben, wie häufig ein Teilchen, sofern möglich, d. h. der betreffende Nachbarplatz ist unbesetzt, nach links bzw. rechts springt. Teilchen können immer nur einen Gitterplatz weiter springen. Aufgrund der Bedingung, dass ein Gitterplatz maximal von einem Teilchen besetzt werden kann, können sich die Teilchen nicht gegenseitig überholen [6, 7]. Für ungleiche Raten

$$\Gamma_L \neq \Gamma_R$$

ergibt sich ein Teilchentransport in eine Vorzugsrichtung.

1.1.2 BASEP

Das Problem, ein direkt mit einem ASEP vergleichbares Experiment zu entwerfen, was dadurch hervorgerufen wird, dass die meisten in Experimenten untersuchbaren Systeme sich schlecht durch eine diskrete Ortsvariable beschrie-

ben lassen, kann mit dem BASEP umgangen werden. Beim BASEP (Brownian ASEP) wird eine kontinuierliche Ortsvariable verwendet und die beim ASEP vorhandenen Gitterplätze werden durch ein periodisches Potential repräsentiert. Die unterschiedlichen Sprungraten für beide Richtungen werden durch eine in eine feste Richtung wirkende Kraft ersetzt [6].

1.1.3 TASEP

Bei dem TASEP handelt es sich um eine andere Abwandlung des ASEP. Hier liegt eine vollständige Asymmetrie vor, d. h. es gilt

$$\Gamma_L = 0 \quad \text{und} \quad \Gamma_R > 0$$

für einen Transport nach rechts [6]. Die Untersuchung eines solchen Systems mit einer zusätzlich eingeführten repulsiven Nächsten-Nachbar-Wechselwirkung ist das Thema dieser Arbeit.

2 TASEP mit repulsiver Nächster-Nachbar-Wechselwirkung

Im Folgenden wird beschrieben, wie der für die Simulationen verwendete TASEP (totally asymmetric simple exclusion process) funktioniert. Als Grundlage für die numerische Berechnung wird ein Programm von Marcel Dierl (Universität Osnabrück) verwendet, das von Marco Bosi (Universität Osnabrück) weiterentwickelt wurde.

2.1 Aufbau und Besetzung des Gitters

Es wird ein eindimensionales Gitter mit einer Anzahl von Plätzen bzw. einer Länge L verwendet. Dieses L wird später für verschiedene Simulationen unterschiedlich festgelegt, um die Abhängigkeit des Verhaltens des Systems von L zu untersuchen. Jeder Gitterplatz x kann entweder von genau einem Teilchen belegt sein, dann ist dieser Platz besetzt (mit Besetzungszahl $n_x = 1$) oder der Gitterplatz ist leer, also unbesetzt ($n_x = 0$) [7].

2.2 Dynamik

Das System verhält sich total asymmetrisch, d. h. die Teilchen können sich ausschließlich in eine Richtung bewegen. Weiterhin können die Teilchen immer nur zum jeweils nächsten Gitterplatz springen, sie können sich also nicht gegenseitig überholen. Bei den Sprungraten der Teilchen handelt es sich um Glauber-Raten [7]:

$$\Gamma(n_{x-1}, n_{x+2}) = \frac{\nu}{\exp\left(\frac{1}{k_B T}(n_{x+2} - n_{x-1})V\right) + 1}. \quad (1)$$

Dabei wird eine konstante Sprungrate ν in Abhängigkeit von der vorherigen Besetzungszahl n_{x-1} sowie der übernächsten Besetzungszahl n_{x+2} modifiziert; k_B ist die Boltzmann-Konstante, T die Temperatur und V die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung. Im Folgenden werden alle Energien in Einheiten von $k_B T$ angegeben. Dichten entsprechen Besetzungswahrscheinlichkeiten von Gitterplätzen. In Abbildung 1 wird das Auftreten der Sprungraten dargestellt. Dieses Verhalten beschreibt eine repulsive Nächste-Nachbar-Wechselwirkung mit der Wechselwirkungsstärke V . Mithilfe dieser Sprungraten wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Zeitpunkt des nächsten Sprungs berechnet. Mit dieser Verteilung und einem Generator von Pseudozufallszahlen (Mersenne-Twister) wird für jedes Teilchen im System ein konkreter Zeitpunkt für den nächsten Sprung festgelegt. Nach einem Sprung werden die Zeitpunkte der nächsten Sprünge für die Teilchen auf den angrenzenden Gitterplätzen sowie für das gesprungene Teilchen selbst neu berechnet, da sich für diese Teilchen $\Gamma(n_{x-1}, n_{x+2})$ verändert haben könnte [7].

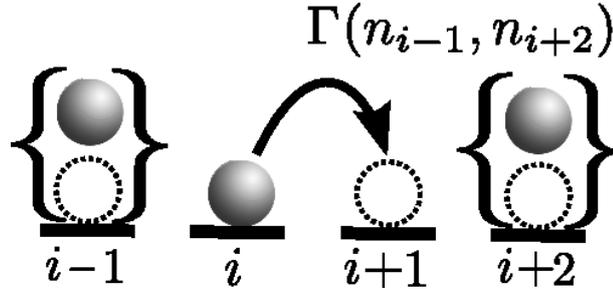


Abbildung 1: Illustration von möglichen Teilchensprüngen im Systeminneren und zugehörigen Sprungraten. Grafik aus [3].

2.3 Reservoir

Es werden keine periodischen Randbedingungen angenommen, stattdessen werden an den Grenzen des Systems Übergänge zu einem linken und einem rechten Reservoir mit jeweils konstanter Dichte ϱ_L bzw. ϱ_R simuliert. Dazu wird das System an den Rändern um zwei Plätze erweitert, die in den Reservoiren liegen. Es werden zwei Plätze gewählt, um die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung der Teilchen auf den Randplätzen des Systems mit den Teilchen in den Reservoiren zu simulieren. Aus den Dichten ergeben sich die zeitlich gemittelten Besetzungszahlen der Gitterplätze in den Reservoiren. Die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten bestimmter Konfigurationen von Besetzungszahlen innerhalb der Reservoire entspricht der des Auftretens dieser Konfigurationen in einem geschlossenen Ringsystem mit einer mittleren Dichte, die der Dichte des zu simulierenden Reservoirs entspricht. Dieses Vorgehen wird bulk-adaptierte Randankopplung genannt [7, 3].

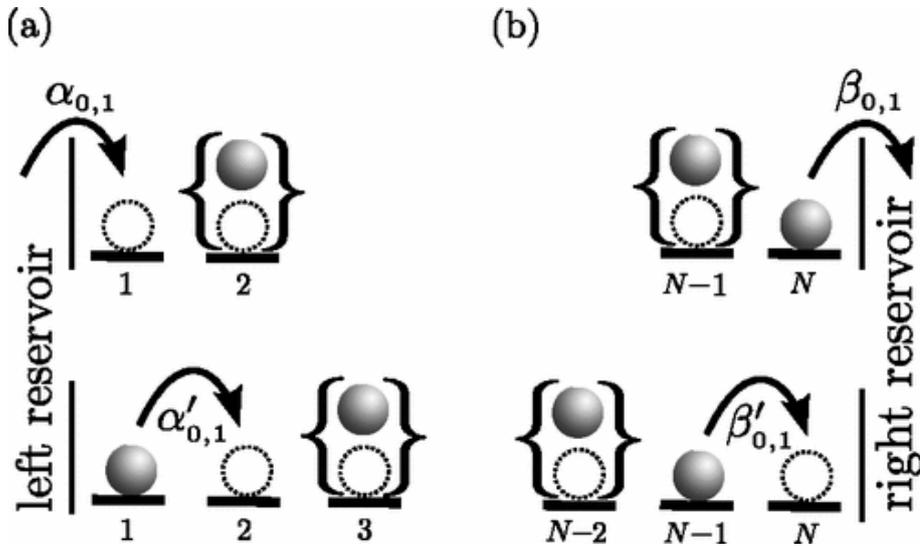


Abbildung 2: Illustration der am Rand des Systems auftretenden Prozesse und der zugehörigen Sprungraten. Grafik aus [3].

Auf dieser Basis werden Eintritts- $\alpha_{0,1}$ bzw. Austrittsraten $\beta_{0,1}$ berechnet, die von den Dichten ϱ_L bzw. ϱ_R abhängig sind. Weiterhin sind diese Raten von der Besetzungszahl (0 oder 1) des zweiten bzw. vorletzten Platzes des Systems abhängig. Analog werden die Raten $\alpha'_{0,1}$ und $\beta'_{0,1}$ berechnet, die für Sprünge relevant sind, die einen Gitterplatz weiter von den Systemgrenzen entfernt stattfinden. Die Prozesse mit diesen Raten werden in Abbildung 2 dargestellt [3].

3 Phasen im TASEP mit repulsiver Nächster-Nachbar-Wechselwirkung

In diesem Kapitel wird das Auftreten verschiedener Phasen im TASEP mit repulsiver Nächster-Nachbar-Wechselwirkung beschrieben.

Wenn das System einen stationären Zustand (NESS = non equilibrium steady state) erreicht hat, liegt im Inneren des TASEPs ein Bereich mit einer konstanten Dichte vor. Diese Dichte wird Bulkdichte ϱ_B genannt. Die unterschiedlichen Phasen sind durch ihre jeweilige Bulkdichte ϱ_B charakterisiert [7]. In Abbildung 3 sind die vorkommenden Phasen und die Abhängigkeit des Vorkommens der Phasen von den Kontrollvariablen, also von den Dichten an den Rändern des Systems ϱ_L und ϱ_R dargestellt.

3 PHASEN IM TASEP MIT REPULSIVER NÄCHSTER-NACHBAR-WECHSELWIRKUNG

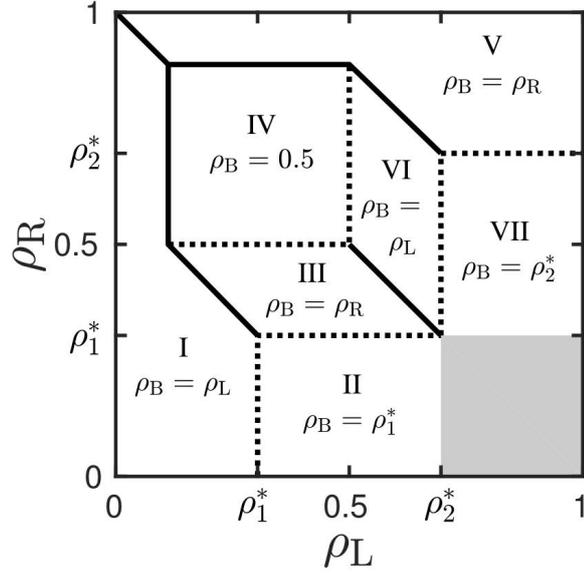


Abbildung 3: Diagramm der verschiedenen Phasen, die im TASEP mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung ($V \approx 2V_*$, siehe Abbildung 4 für Bedeutung der kritischen Wechselwirkungsstärke V_*) vorkommen, in Abhängigkeit der Kontrollvariablen ϱ_L und ϱ_R . Bei durchgezogenen Linien handelt es sich um Phasenübergänge erster Ordnung und bei gestrichelten Linien um Phasenübergänge zweiter Ordnung. Grafik aus [7].

In vielen Fällen nimmt das System eine der Randdichten an. Jedoch kann auch $\varrho_B = \frac{1}{2}$ vorkommen, ohne dass dies genau einer der Dichten an den Rändern entspricht. Es können auch die Dichten $\varrho_B = \varrho_{1,2}^*(V)$ mit

$$\varrho_{1,2}^*(V) = \frac{1}{2} \mp \sqrt{\frac{3}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2e^V}{e^V - 1}}} \quad (2)$$

vorkommen. Diese Dichten maximieren den Bulkstrom $j_B(\varrho)$, also den Strom, der bei einer räumlich konstanten Dichte ϱ auftritt [8]. Das Auftreten der beiden Maxima ist in Abbildung 4 zu sehen.

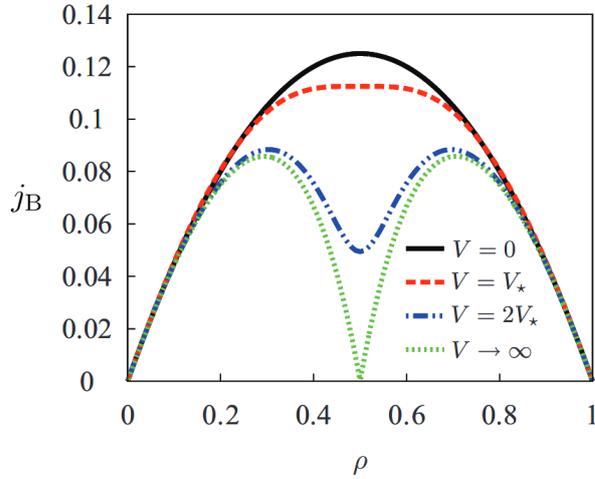


Abbildung 4: Bulkstrom in Abhängigkeit von der Teilchendichte für verschiedene Wechselwirkungsstärken V . Ab einem kritischen $V_* \approx 2,20$ treten zwei Maxima auf. Grafik aus [3].

Weiterhin gibt es einen Bereich, in dem zwei koexistierende Phasen maximalen Stroms vorkommen. Dieser Bereich ist in Abbildung 3 in grau eingezeichnet [7]. Bei den dabei vorkommenden Dichten handelt es sich um $\rho_1^*(V)$ und $\rho_2^*(V)$ [3, 8]. Im Folgenden wird die Grenzfläche zwischen diesen beiden Phasen bzw. deren zeitliches Verhalten im Detail untersucht.

4 Dichteprofil

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie das Dichteprofil des TASEPs bestimmt werden kann und was bei dem so erhaltenen Profil zu erkennen ist.

4.1 Bestimmung des Dichteprofiles

Da ein Gitterplatz maximal ein Teilchen aufnehmen kann, ist es nicht möglich, eine sinnvolle Dichte für einen Platz zu einem Zeitpunkt anzugeben. Dies wären lediglich die Besetzungszahlen des Systems zu einem Zeitpunkt. Um ein Dichteprofil zu erhalten, muss eine Mittelung durchgeführt werden. Um ein Dichteprofil zu bestimmen, werden die Besetzungszahlen n_x über einen Zeitraum gemittelt [7]. Als Beispiel ist in Abbildung 5 ein mit dieser Methode bestimmtes Dichteprofil für ein System der Länge $L = 4000$ dargestellt.

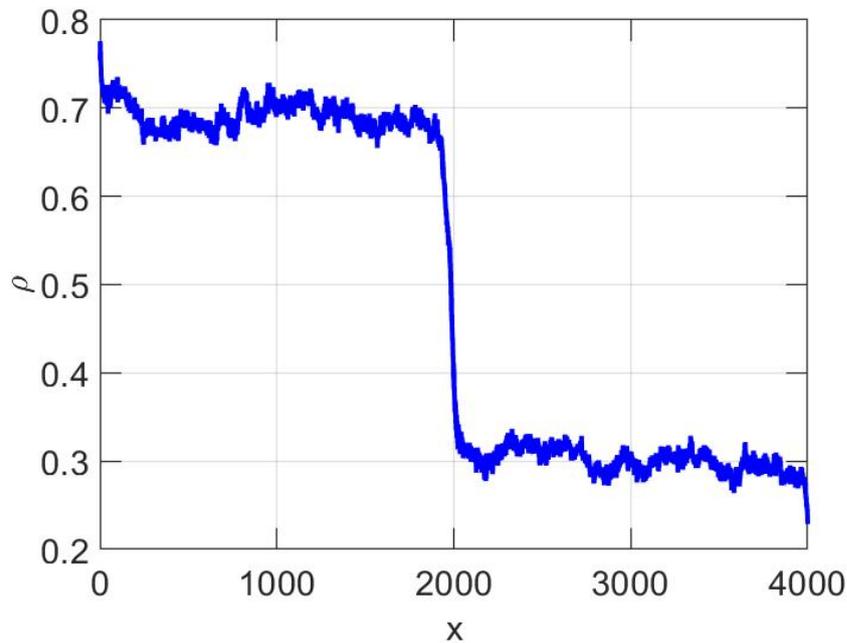


Abbildung 5: Dichteprofil eines Systems mit $L = 4000$ Plätzen für $V = 4,4$, $\rho_L = 0,8$ und $\rho_R = 0,2$.

In dieser Abbildung ist eine Grenzfläche zwischen zwei Phasen verschiedener Dichte zu erkennen.

4.2 Begrenzte Nutzbarkeit dieser Bestimmungsmethode

Im Weiteren soll diese Grenzfläche genauer untersucht werden. Hier tritt allerdings das Problem auf, dass, wenn eine zeitliche Entwicklung dieser Grenzfläche untersucht wird, die zeitliche Auflösung durch die zuvor beschriebene Mittelung begrenzt ist [7]. Die Lösung dieses Problems, d. h. eine alternative Methode, um die Position und Ausdehnung der Grenzfläche zu bestimmen, wird in Abschnitt 5 beschrieben.

5 Bestimmung der Grenzflächenbreite

Dieser Abschnitt behandelt die Methodik, mit der die Ausdehnung der Grenzfläche zwischen koexistierenden Phasen unterschiedlicher Dichten bestimmt wird.

5.1 Geistteilchen

Es werden sogenannte Geistteilchen eingeführt, die das Verhalten des TASEPs nicht verändern, sondern lediglich aufgrund ihres Verhaltens der Grenze zwischen den beiden Phasen folgen. Nach jeder Änderung des Systemzustands werden $R = 10$ zufällig ausgewählte Geistteilchen der insgesamt im System vorhandenen $N_g = 20$ Geistteilchen aufgerufen. Für $\varrho_L > 0,5 > \varrho_R$ wird folgende Dynamik für die jeweils aufgerufenen Geistteilchen festgelegt: Befindet sich an der Position des Geistteilchens ein reguläres Teilchen, bewegt sich das Geistteilchen um einen Gitterplatz nach rechts. Andernfalls bewegt es sich um einen Platz nach links. Diese Methode lässt sich auch für $\varrho_L < 0,5 < \varrho_R$ anwenden, dann erfolgt die Bewegung der Geistteilchen entsprechend in umgekehrter Richtung. Die Geistteilchen folgen also der Position x , bei der $\langle n_x \rangle = 0,5$ gilt. Die Anzahl der Geistteilchen N_g bleibt während einer Simulation konstant, diese Teilchen können das System also nicht verlassen [7].

5.2 Definition der Grenzflächenbreite

$x_i(t)$ ist die Position des i -ten Geistteilchens zum Zeitpunkt t . Die mittlere Position der Geistteilchen zum Zeitpunkt t ist

$$\bar{x}(t) = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} x_i(t). \quad (3)$$

Die mittlere Position der Geistteilchen im Zeitintervall $t' = 0$ bis $t' = t$ ist

$$\bar{X}(t) = \frac{1}{(t+1)N_g} \sum_{t'=0}^t \sum_{i=1}^{N_g} x_i(t'). \quad (4)$$

Als Maß der Grenzflächenbreite zwischen den beiden Phasen wird

$$w(t) = \sqrt{\frac{1}{(t+1)N_g} \sum_{t'=0}^t \sum_{i=1}^{N_g} (x_i(t') - \bar{X}(t'))^2} \quad (5)$$

definiert. Als weitere Größe zur Charakterisierung der Grenzflächenbreite wird

$$w_{\text{av}}(t) = \sqrt{\frac{1}{(t+1)} \sum_{t'=0}^t (\bar{x}(t') - \bar{X}(t'))^2} \quad (6)$$

betrachtet. Die Breite $w_{\text{av}}(t)$ unterscheidet sich von $w(t)$ darin, dass bei der Berechnung von $w_{\text{av}}(t)$ lediglich die mittlere Position der Geistteilchen zu den verschiedenen Zeitpunkten berücksichtigt wird. Daher ist $w_{\text{av}}(0) = 0$, während $w(0) = w_{\text{intr}}$ gilt, wobei w_{intr} die intrinsische Grenzflächenbreite definiert,

welche durch die Verteilung der Geistteilchen zum Zeitpunkt $t = 0$ bestimmt wird [7].

6 Untersuchung der zeitlichen Entwicklung der Grenzflächenverbreiterung

Im Folgenden wird das Verhalten von $w(t, L)$ und $w_{av}(t, L)$ für $\varrho_L = 0, 8$, $\varrho_R = 0, 2$ und $V = 4, 4 \approx 2V_*$ analysiert und die Resultate werden mit Vermutungen aus älteren Analysen verglichen.

6.1 Ursprüngliche Annahme

Frühere Untersuchungen von $w(t, L)$ haben das in Gleichung (10) spezifizierte Skalenverhalten der Sättigungsbreite $w_{sat}(L)$ mit der Systemgröße L nahegelegt [7] und es gab erste Hinweise auf ein Potenzgesetzverhalten hinsichtlich der zeitlichen Verbreiterung der Grenzfläche:

$$w(t, L) = L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) \quad (7)$$

$$\text{mit } f(x) \sim \begin{cases} x^\beta, & x \ll 1 \\ \text{konst.}, & x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (8)$$

$$\text{und } \alpha = \frac{3}{4}, \quad \beta = \frac{1}{3}, \quad z = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{9}{4} \quad (9)$$

$$w(t, L) \sim w_{sat}(L) \sim L^\alpha \quad \text{für } t \rightarrow \infty \quad (10)$$

6.2 Neue Simulationen

Es werden weitere Simulationen unter Verwendung von größeren Rechenkapazitäten durchgeführt. Dazu wird zunächst die vorhandene Implementierung optimiert, so werden z. B. Teile der Auswertung schon während der Simulation durchgeführt, um die Menge der Daten, die auf die Festplatte geschrieben werden, stark zu reduzieren. So lässt sich einerseits die für die Schreibvorgänge benötigte Zeit verringern, andererseits würden alle zur Verfügung stehenden Festplatten sonst nicht ausreichen, um die Ergebnisse abzuspeichern. Insbesondere werden größere L untersucht und Mittelwerte über größere Anzahlen von Simulationen gebildet. Zusätzlich wird eine hohe zeitliche Auflösung der bestimmten Punkte $w(t, L)$ erreicht.

6 UNTERSUCHUNG DER ZEITLICHEN ENTWICKLUNG DER GRENZFLÄCHENVERBREITERUNG

In Abbildung 6 sind für unterschiedliche L die verschiedenen Sättigungswerte $w_{\text{sat}}(L)$ zu erkennen.

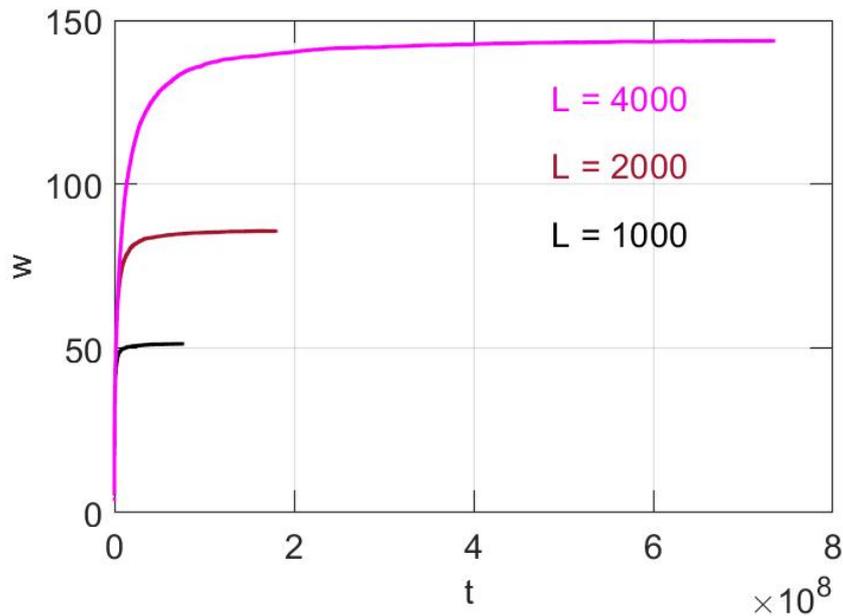


Abbildung 6: Grenzflächenbreite $w(t, L)$ als Funktion von t für verschiedene L . Es werden für große Zeiten unterschiedliche Sättigungswerte $w_{\text{sat}}(L)$ erreicht.

Die Sättigungswerte $w_{\text{sat}}(L)$ werden doppeltlogarithmisch gegen L aufgetragen, um das in Gleichung (10) beschriebene Verhalten zu überprüfen. Dies ist in Abbildung 7 zu sehen.

Diese Untersuchung bestätigt Gleichung (10), allerdings ist zu beachten, dass es für kleine L insbesondere $L < 400$ zu größeren Abweichungen kommt. Für große L gibt es dagegen eine gute Übereinstimmung.

6 UNTERSUCHUNG DER ZEITLICHEN ENTWICKLUNG
DER GRENZFLÄCHENVERBREITERUNG

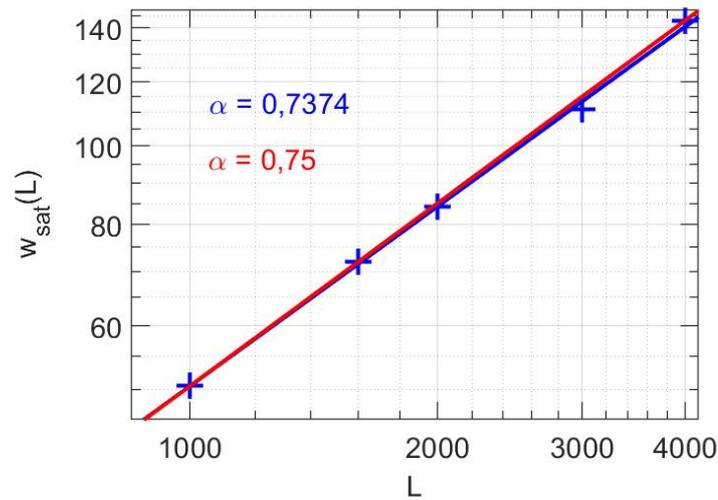


Abbildung 7: Sättigungswert $w_{\text{sat}}(L)$ als Funktion von L in doppeltlogarithmischer Auftragung. Eine lineare Regression (blaue Linie) ergibt ein Potenzgesetz-Verhalten $w_{\text{sat}}(L) \sim L^\alpha$ mit einem Exponenten $\alpha = 0,7374$ nahe $\frac{3}{4}$ (rote Linie).

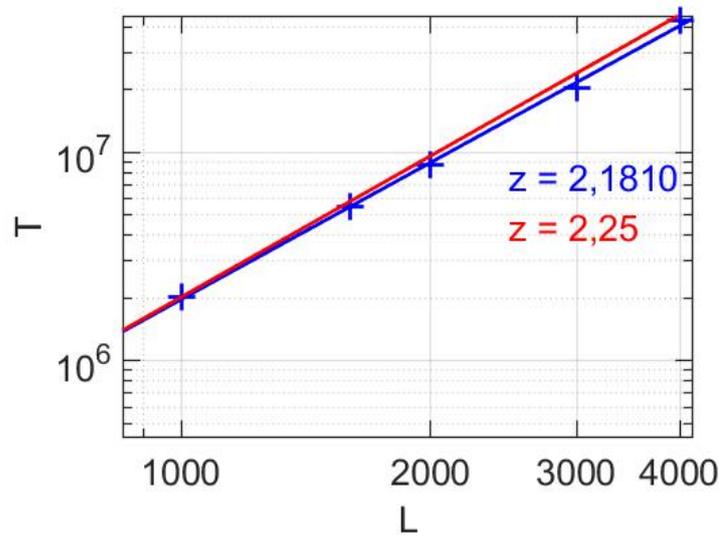


Abbildung 8: Übergangszeit T zur Sättigung der Grenzflächenbreite als Funktion von L in doppeltlogarithmischer Auftragung. Eine lineare Regression (blaue Linie) ergibt ein Potenzgesetz-Verhalten $T \sim L^z$ mit einem Exponenten $z = 2,181$ nahe $\frac{9}{4}$ (rote Linie).

6 UNTERSUCHUNG DER ZEITLICHEN ENTWICKLUNG DER GRENZFLÄCHENVERBREITERUNG

Die so bestätigte Skalierung lässt sich auf $w(t, L)$ anwenden. Die Funktion $\frac{w(t, L)}{L^{3/4}}$ hat für alle L im Limes $t \rightarrow \infty$ denselben Sättigungswert. Unter Berücksichtigung dieser Skalierung kann der Zeitpunkt T bestimmt werden, bei dem ein Wert nahe der Sättigung erreicht wird ($w(T, L) = 0,87w_{\text{sat}}(L)$). In Abbildung 8 ist T doppeltlogarithmisch gegen L aufgetragen, um das Skalierungsverhalten von T mit L zu untersuchen.

Im Wesentlichen lässt sich das in Abschnitt 6.1 beschriebene Verhalten bestätigen. Die numerischen Ergebnisse für $w(t, L)$ werden mit entsprechender überprüfter Skalierung in Abbildung 9 dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass die Verläufe für verschiedene L sich insbesondere für große und mittlere $\frac{t}{L^4}$ überlagern. Dies bedeutet, dass die Skalierung für diese Bereiche gut gewählt ist.

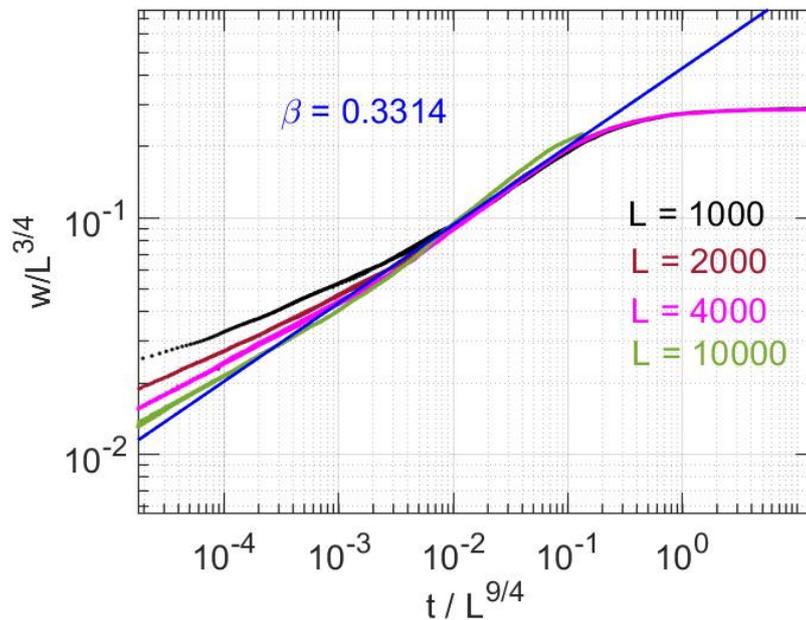


Abbildung 9: Skalierte Grenzflächenbreite $\frac{w(t, L)}{L^{3/4}}$ als Funktion von $\frac{t}{L^4}$ für verschiedene L in doppeltlogarithmischer Auftragung. Eine lineare Regression (blaue Linie) ergibt ein Potenzgesetz-Verhalten $w(t, L) \sim t^\beta$ mit einem Exponenten $\beta = 0,3314$ nahe $\frac{1}{3}$. Alle Systemgrößen werden dabei gleich gewichtet, der Verlauf für jede Systemgröße ist über jeweils 1000 Simulationen gemittelt.

Es fällt allerdings auf, dass es für kleine $\frac{t}{L^4}$ Abweichungen von dem zu erwartenden Verhalten gibt. Die Untersuchungen von Systemen mit großen L legen entsprechend Abbildung 10 nahe, dass es für kleine $\frac{t}{L^4}$ einen Bereich gibt, in dem $w(t) \propto t^{1/4}$ gilt.

6 UNTERSUCHUNG DER ZEITLICHEN ENTWICKLUNG DER GRENZFLÄCHENVERBREITERUNG

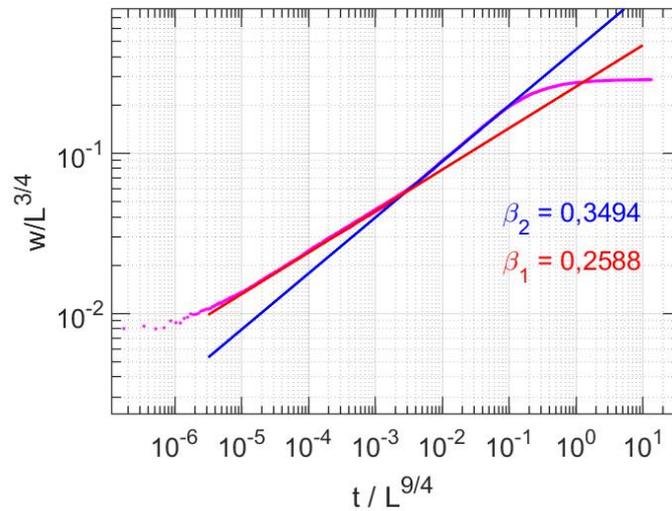


Abbildung 10: Skalierte Grenzflächenbreite $\frac{w(t,L)}{L^{3/4}}$ als Funktion von $\frac{t}{L^{9/4}}$ für $L = 4000$ in doppeltlogarithmischer Auftragung. Lineare Regressionen ergeben Potenzgesetz-Verhalten $w(t, 4000) \sim t^\beta$ mit den Exponenten $\beta_1 = 0,2588$ und $\beta_2 = 0,3494$.

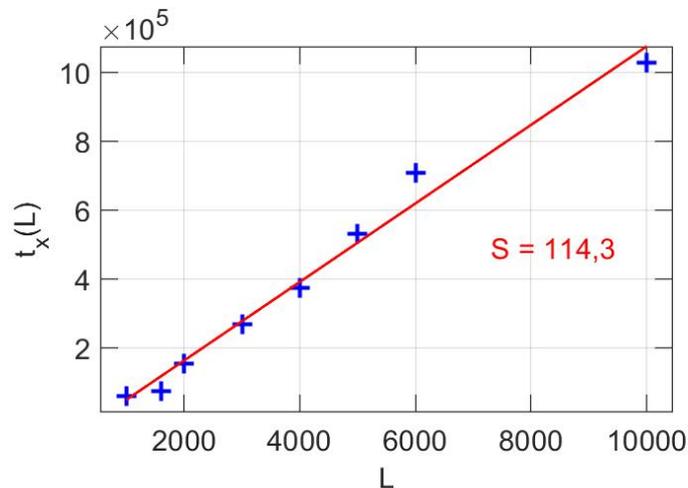


Abbildung 11: Der Zeitpunkt, an dem sich das Wachstumsverhalten ändert $t_x(L)$ als Funktion von L . Eine lineare Regression ergibt einen linearen Zusammenhang $t_x(L) = 114,3L$.

Die Zeit, bei der sich das Wachstumsverhalten von $w(t, L) \sim t^{1/4}$ zu $w(t, L) \sim$

6 UNTERSUCHUNG DER ZEITLICHEN ENTWICKLUNG DER GRENZFLÄCHENVERBREITERUNG

$t^{\frac{1}{3}}$ ändert wird als $t_x = t_x(L)$ bezeichnet. Sie entspricht dem Argument $\frac{t_x}{L^{\frac{9}{4}}}$, bei dem sich die Geraden in Abbildung 10 schneiden. Dabei hängt der Zeitpunkt t_x , bei dem sich das Wachstumsverhalten von $t^{\frac{1}{4}}$ zu $t^{\frac{1}{3}}$ ändert, nahezu linear von der Systemgröße ab. Dies ist in Abbildung 11 dargestellt.

Wenn $w_{av}(t)$ betrachtet wird (siehe Abbildung 12) und damit die intrinsische Breite w_{intr} außer Acht gelassen wird, ist für sehr kleine t eine höhere Steigung zu erkennen.

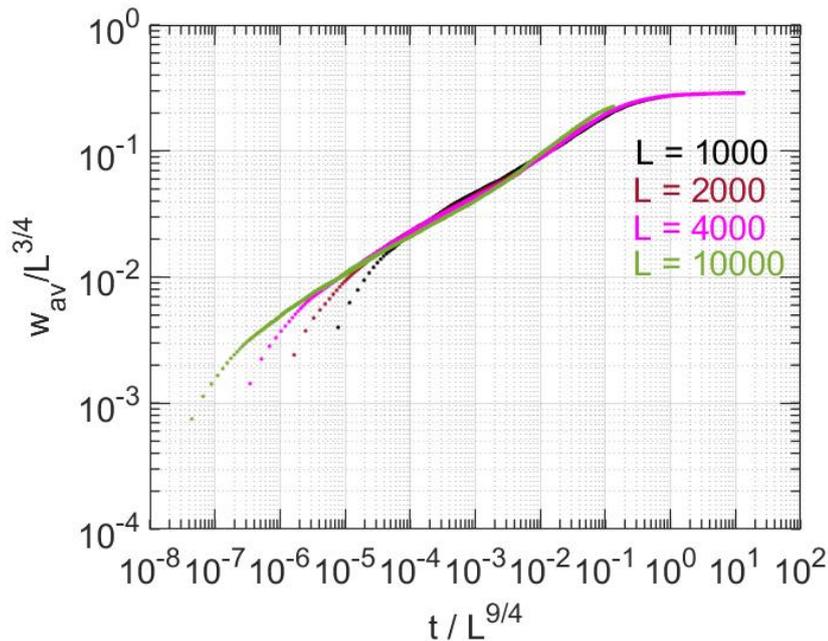


Abbildung 12: Skalierte Grenzflächenbreite $\frac{w_{av}(t,L)}{L^{\frac{3}{4}}}$ als Funktion von $\frac{t}{L^{\frac{9}{4}}}$ für verschiedene L in doppeltlogarithmischer Auftragung. Für sehr kleine $\frac{t}{L^{\frac{9}{4}}}$ ist ein weiterer Bereich mit einem höheren Exponenten $\beta \approx 1$ zu erkennen.

Eventuell wird das Wachstum der Ordnung $t^{\frac{1}{4}}$ durch die Mittelung über verschiedene Anfangszustände des Systems hervorgerufen. Bei den bisherigen Simulationen wurde bei jeder neuen Simulation ein neuer stationärer Zustand als Anfangszustand verwendet. Dieses Verhalten ist bei ähnlichen Systemen bereits bekannt [9, 11]. Wenn ein einziger Anfangszustand für alle Simulationen verwendet wird, sollte demnach das Wachstum der Ordnung $t^{\frac{1}{4}}$ nicht mehr auftreten.

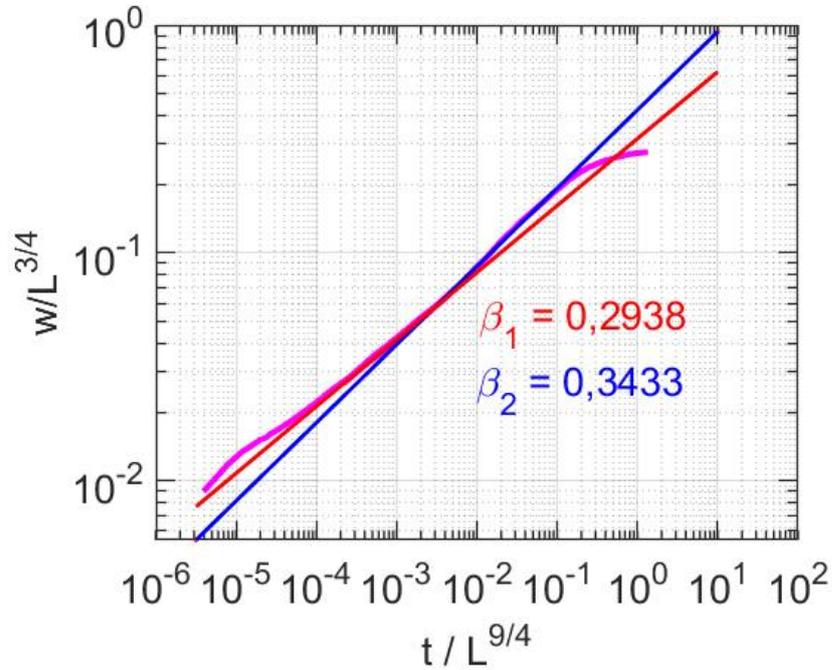


Abbildung 13: Skalierte Grenzflächenbreite $\frac{w(t,L)}{L^{3/4}}$ als Funktion von $\frac{t}{L^{9/4}}$ für $L = 4000$ in doppeltlogarithmischer Auftragung. Alle Simulationen beginnen bei derselben Anfangskonfiguration. Lineare Regressionen ergeben Potenzgesetz-Verhalten $w(t, 4000) \sim t^\beta$ mit den Exponenten $\beta_1 = 0,2938$ und $\beta_2 = 0,3433$.

Die Ergebnisse einer Durchführung solcher Simulationen für eine Länge ($L = 4000$, siehe Abbildung 13) lassen allerdings keine eindeutige Antwort auf diese Vermutung zu. Die Steigung ändert sich in diesem Fall im relevanten Bereich von etwa 0,2588 zu 0,2938. Allerdings ist aufgrund der Art der Berechnung von $w(t, L)$ das Ergebnis für kleine t stärker von Fluktuationen betroffen. Ein Mittelwert über mehr Simulationen (z. B. 10000) könnte eventuell eine klarere Antwort liefern. Jedoch lassen sich Fluktuationen für sehr kleine t nicht vermeiden, wenn diese ihren Ursprung in der gewählten Anfangskonfiguration haben.

7 Analytischer Ansatz für das Dichteprofil $\varrho(x, t)$

Im Folgenden wird versucht, eine analytische Beschreibung für das Verhalten des Systems zu finden.

7.1 Ausgangspunkt: ASEP

Für den ASEP ohne Wechselwirkung wurde bereits eine Differentialgleichung (11) gefunden, die das Verhalten des Dichteprofiles $\varrho(x, t)$ in einer Kontinuumsdarstellung beschreibt [5]:

$$\frac{\partial \varrho(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial j_B(\varrho(x, t))}{\partial x} + D \frac{\partial^2 \varrho(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x}. \quad (11)$$

Hierbei ist $\eta(x, t)$ ein Gaußsches Zufallsfeld mit Mittelwert

$$\overline{\eta(x, t)} = 0 \quad (12)$$

und Korrelationsfunktion

$$\overline{\eta(x, t)\eta(x', t')} = 2A\delta(x - x')\delta(t - t'). \quad (13)$$

Der Strom $j_B(\varrho(x, t))$ ist der Bulkstrom des nicht wechselwirkenden ASEPs mit Sprungraten p und q für Sprünge nach rechts bzw. nach links:

$$j_B(\varrho(x, t)) = (p - q)\varrho(x, t)(1 - \varrho(x, t)). \quad (14)$$

Diese Gleichung wurde ausgehend von der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (15)$$

hergeleitet. Da nur der Bulkstrom analytisch beschrieben ist und dieser nur für räumlich konstante Dichten anwendbar ist, wird zusätzlich eine Diffusion mit einer Diffusionskonstante D eingeführt. Weiterhin wird das stochastische Verhalten des Dichteprofiles durch Einfügen eines gaußschen Störterms hervorgerufen [5].

7.2 Übertragung auf wechselwirkenden TASEP

Die Theorie zur Bestimmung des Dichteprofiles wird nun auf den TASEP mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung übertragen. Dazu wird der bekannte Bulkstrom [8]

$$j_B(\varrho) = 2\nu \left[\left(\varrho - C^{(1)} \right)^2 \frac{2f - 1}{2\varrho(1 - \varrho)} + \left(\varrho - C^{(1)} \right) (1 - f) \right] \quad (16)$$

$$\text{mit } f = \frac{1}{e^V + 1} \quad (17)$$

$$\text{und } C^{(1)} = \langle n_x n_{x+1} \rangle_{\text{eq}} \quad (18)$$

$$= \frac{1}{2(1 - e^{-V})} \left[2\varrho(1 - e^{-V}) - 1 + \sqrt{1 - 4\varrho(1 - \varrho)(1 - e^{-V})} \right] \quad (19)$$

verwendet.

7.3 Lösung der Gleichung und Bestimmung der freien Parameter

Die daraus resultierende Gleichung wird numerisch gelöst. Durch Variation von D und A wird zunächst das mittlere Dichteprofil

$$\bar{\varrho}_{\text{Analytisch}}(x) = \frac{1}{T} \int_{t=0}^T \varrho_{\text{Analytisch}}(x, t) dt, \quad T \longrightarrow \infty \quad (20)$$

an das der TASEP-Simulationen

$$\bar{\varrho}_{\text{TASEP}}(x) = \frac{1}{T} \int_{t=0}^T \varrho_{\text{TASEP}}(x, t) dt, \quad T \longrightarrow \infty \quad (21)$$

angepasst. Dabei wird der quadratische Fehler (22) minimiert.

$$F_1 = \int_{x=0}^{L=1000} g(x) (\bar{\varrho}_{\text{TASEP}}(x) - \bar{\varrho}_{\text{Analytisch}}(x))^2 dx \quad (22)$$

$$\text{mit } g(x) = \begin{cases} 10, & x \leq 200 \quad \text{oder} \quad x \geq 800 \\ 1, & \text{sonst} \end{cases} \quad (23)$$

Da kleine Abweichungen der Position der Grenzfläche stark zu F_1 beitragen und das Verhalten von $\bar{\varrho}(x)$ an den Grenzen des Systems wesentlich weniger Fluktuationen unterliegt, dafür aber stärker von den gewählten Parametern abhängt, wird der Beitrag zu F_1 dort stärker gewichtet als in der Mitte des Systems. Weiterhin wird auch das Verhalten der Grenzfläche mit dem in den TASEP-Simulationen auftretenden Verhalten verglichen.

Dazu muss zunächst auch die Position der Grenzfläche während der Berechnung der Lösung der zu Gleichung (11) korrespondierenden Gleichung verfolgt werden. Dabei wird in der Nähe der letzten bekannten Position nach einer Stelle mit $\varrho(x) \approx 0,5$ gesucht und eine Position verwendet, die weniger als eine Einheit in x -Richtung von $\varrho(x) = 0,5$ entfernt liegt. Als erste Ausgangsposition wird die Position verwendet, die am nächsten an $x = 0$ liegt und für die $\varrho(x) < 0,5$ gilt. Für $\varrho_L = 0,8$ und $\varrho_R = 0,2$ wird wie folgt vorgegangen:

$\varrho(x_{\text{vorher}}) = 0,5$
 x_{vorher} bleibt die gesuchte Position

$\varrho(x_{\text{vorher}}) > 0,5$
 x wird ausgehend von $x = x_{\text{vorher}}$ solange erhöht, bis erstmals $\varrho(x) < 0,5$ eintritt

$\varrho(x_{\text{vorher}}) < 0,5$
 x wird ausgehend von $x = x_{\text{vorher}}$ solange verringert, bis erstmals $\varrho(x) > 0,5$ eintritt

Durch diese Vorgehensweise wird sichergestellt, dass extreme Fluktuationen von $\varrho(x)$, deren Risiko durch Laufzeitverbesserungen durch Verlängerung der Integrationsschritte steigt, nicht als neue Grenzflächenposition gewertet werden. Weiterhin lässt sich so der Rechenaufwand etwas reduzieren, da ausgehend von der vorherigen Position die neue Position in wenigen Schritten gefunden werden kann.

Mit den Daten aus der numerischen Lösung von Gleichung (11) kann wie zuvor beim TASEP $w_{\text{av}}(t, L)$ berechnet werden. Anschließend wird auch für dieses Verhalten eine Metrik festgelegt, die den Fehler zwischen der Lösung der analytischen Gleichung und den TASEP-Simulationen angibt:

$$F_2 = \int_{t=0}^{100000} \log_{10}^2 \left(\frac{w_{\text{av, TASEP}}(t, L)}{w_{\text{av, Analytisch}}(t, L)} \right) dt \quad (24)$$

Weiterhin werden auch lineare Regressionen logarithmierter Daten zur Bestimmung der Exponenten durchgeführt und die erhaltenen Exponenten β verglichen:

$$F_3 = 3000(\beta_{\text{TASEP}} - \beta_{\text{Analytisch}})^2 \quad (25)$$

Dann wird der Gesamtfehler berechnet:

$$F_{\text{tot}} = F_1 + F_2 + F_3 \quad (26)$$

Die Verwendung dieser Fehlerberechnung und die Festlegung des Vorfaktors ist zwar aufwendig, aber dennoch notwendig. Ohne den Vorfaktor liegen die einzelnen Beiträge zum Gesamtfehler in unterschiedlichen Größenordnungen. Der Faktor dient also dazu, dass ähnlich gravierende Abweichungen in einzelnen Teilaspekten zu ähnlich großen Beiträgen zum Gesamtfehler führen. Eine Optimierung unter Berücksichtigung einzelner der zuvor beschriebenen Fehler führt in vielen Fällen zu einem komplett anderen Verhalten in den nicht berücksichtigten Teilaspekten des Systems. Dies kann z. B. dazu führen, dass die Steigung eine gute Übereinstimmung liefert, aber die Größenordnung von $w_{\text{av}}(t, L)$ stark abweicht und das Dichteprofil im Mittel ein völlig anderes Verhalten aufweist.

Der Gesamtfehler F_{tot} ist in Abbildung 14 in Abhängigkeit der freien Parameter dargestellt. Die Suche nach dem kleinsten Fehler wird für $L = 1000$ durchgeführt, da dieses System einerseits klein genug ist, um die vielen Simulationen in vertretbarer Zeit durchzuführen und andererseits groß genug ist, um das Verhalten für große L zu untersuchen.

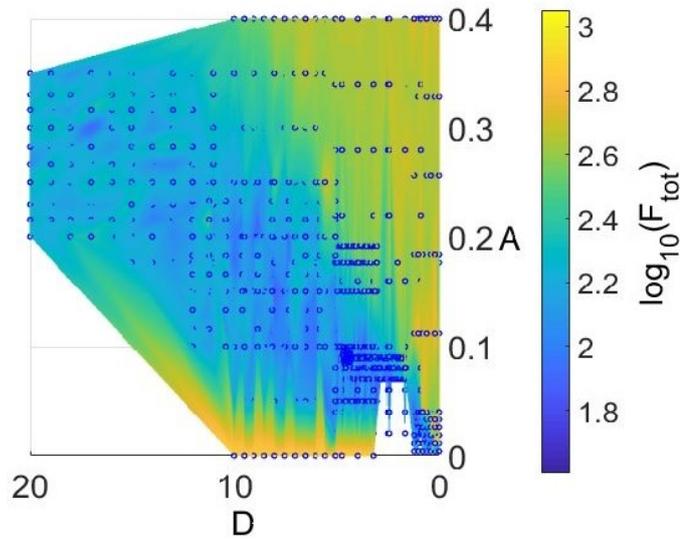


Abbildung 14: Logarithmus $\log_{10}(F_{\text{tot}})$ entsprechend der Gleichungen (22) bis (26) in Abhängigkeit der Parameter D und A in Gleichung (11) in einer farbkodierten Darstellung. Die Werte für $\log_{10}(F_{\text{tot}})$ ergeben sich aus dem nebenstehenden Balken für die Farbkodierung. Zur Farbdarstellung werden die an einzelnen Punkten (Kreissymbole) ermittelten Werte für $\log_{10}(F_{\text{tot}})$ linear interpoliert.

Es ist zu erkennen, dass im betrachteten Parameterraum viele verschiedene lokale Minima auftreten. Aufgrund dieses Verhaltens der Lösungen der Gleichung (11) ist es nicht möglich, zuverlässig Rückschlüsse auf das globale Verhalten des Fehlers zu ziehen. So kann z. B. bei kontinuierlicher Änderung eines der Parameter das mittlere Dichteprofil seine grundlegende Form mehrfach ändern. Es lassen sich auch Profile finden, die stark dem der MC-Phase des nicht-wechselwirkenden TASEP ähneln.

Im Folgenden werden die Parameter auf das Minimum des betrachteten Bereichs gesetzt. Das zugehörige Dichteprofil ist in Abbildung 15 dargestellt und ähnelt stark dem des TASEP. Für andere Parameter ist es möglich, eine noch höhere Übereinstimmung beim Dichteprofil zu erreichen. Insbesondere an den Grenzen des Systems kann durch eine leichte Variation von D ein besseres Ergebnis erhalten werden. Allerdings kommt es dann zu noch größeren Abweichungen beim Wachstumsverhalten von $w_{\text{av}}(t, L)$, was zu einem größeren Gesamtfehler führt.

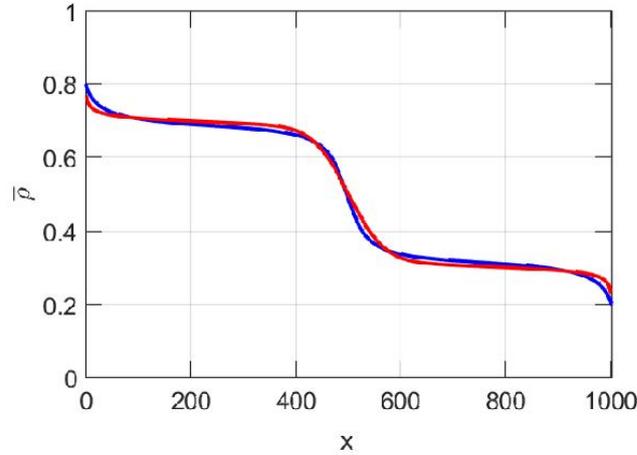


Abbildung 15: Dichteprofil für die Parameter $A = 0,088369$, $D = 4,5$ mit dem niedrigsten Gesamtfehler (blau). Zum Vergleich ist das Dichteprofil der TASEP-Simulation eingezeichnet (rot).

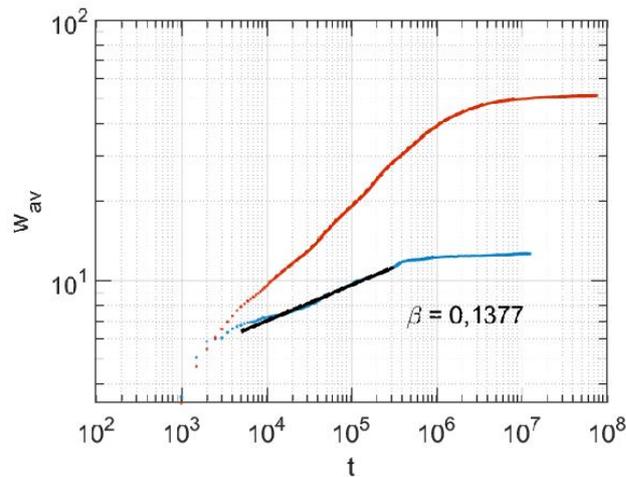


Abbildung 16: Grenzflächenbreite $w_{av}(t, L)$ als Funktion von t aus den TASEP-Simulationen (rot) und aus dem analytischen Ansatz (blau) mit den Parametern $A = 0,088369$ und $D = 4,5$ in doppeltlogarithmischer Auftragung.

Nach Bestimmung möglichst optimaler Parameter D und A wurden längere Simulationen mit diesen Parametern durchgeführt, um die Sättigung von $w_{av}(t, L)$ im Grenzfall $t \rightarrow \infty$ zu analysieren. Abbildung 16 zeigt den Vergleich zu den TASEP-Simulationen. Bei kleinen Zeiten gibt es eine hohe Übereinstimmung, danach kommt es allerdings zu sich stark unterscheidenden Ent-

wicklungen. Die Steigung im Zeitbereich des Anstiegs von $w_{av}(t, L)$ weicht deutlich von den TASEP-Simulationen ab. Dies legt nahe, dass es notwendig wäre, bei der Fehlerbestimmung Simulationen bis zur Sättigung laufen zu lassen. Dies erforderte allerdings deutlich höhere Rechenkapazitäten. Eventuell sind auch weitere Korrekturterme beim Übergang zu einer kontinuierlichen Gleichung erforderlich.

7.4 Überprüfung der Skalierung von $w_{av}(t, L)$

In diesem Abschnitt wird untersucht, ob das beim TASEP gefundene Skalierungsverhalten von $w_{av}(t, L)$ (siehe Abbildung 12) auch für die Lösungen des analytischen Ansatzes gültig ist. Dies wird in Abbildung 17 dargestellt.

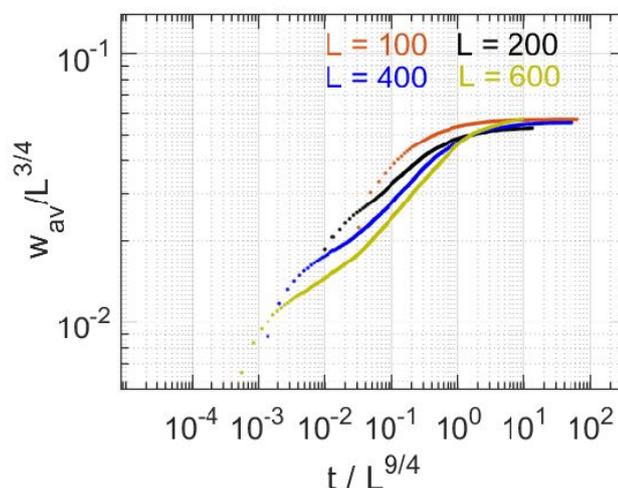


Abbildung 17: Skalierte Grenzflächenbreite $\frac{w_{av}(t, L)}{L^{3/4}}$ als Funktion von $\frac{t}{L^{9/4}}$ in doppeltlogarithmischer Auftragung für verschiedene L unter Verwendung des analytischen Ansatzes mit den Parametern $A = 0,004$ und $D = 1$.

Es ist zu erkennen, dass die Skalierung für den Sättigungswert stimmt. Allerdings gibt es große Abweichungen im Zeitbereich des Anstiegs von $w_{av}(t, L)$. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, dass A und D weiter variiert werden bzw. weitere Korrekturen in die Gleichung eingefügt werden müssen.

8 Erklärungsansätze für das Verhalten der Grenzflächenbreite

Im Folgenden wird das Verhalten von $w_{av}(t, L)$ ausgehend von theoretischen Überlegungen untersucht.

Die Bewegung einer Schockfront im TASEP ist in Abbildung 18 idealisiert dargestellt.

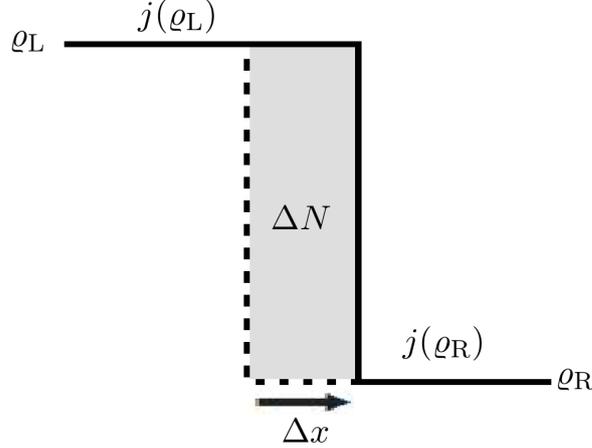


Abbildung 18: Idealisierte Schockfront, die im Zeitintervall Δt eine Strecke Δx zurücklegt.

Dabei kann die Änderung der Teilchenanzahl im betrachteten Ausschnitte einerseits durch die Differenz der Teilchenströme vor und nach der Schockfront beschrieben werden:

$$\Delta N = (j(\varrho_L) - j(\varrho_R))\Delta t. \quad (27)$$

Andererseits kann dieselbe Änderung auch durch die Bewegung der Schockfront dargestellt werden:

$$\Delta N = (\varrho_L - \varrho_R)\Delta x. \quad (28)$$

Durch Gleichsetzung der Gleichungen (27) und (28) kann die Geschwindigkeit v der Schockfront angegeben werden [2]:

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{j(\varrho_L) - j(\varrho_R)}{\varrho_L - \varrho_R}. \quad (29)$$

Um aus dieser Gleichung eine Bewegungsgleichung für die Frontposition herzuleiten, müssen alle vorkommenden Größen als Funktionen von x und t ausgedrückt werden. Weiterhin wird das Verhalten der Dichte in der Umgebung der Grenzfläche $\frac{d\varrho(x_0)}{dx} \propto \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}$ genutzt, das bereits von ähnlichen Systemen bekannt ist [12]. Der Exponent $-\frac{3}{2}$ lässt sich auch durch Analyse der TASEP-Simulationen bestätigen (siehe Abbildungen 19 und 20). Die Grenzfläche zwischen den Phasen ist allerdings nicht scharf wie in der idealisierten Darstellung in Abbildung 18. Das Dichteprofil in der Nähe der Grenzfläche ist nicht konstant und fluktuiert in der Zeit. Im Folgenden wird x_0 als Referenzpunkt, welcher entweder links oder rechts der mittleren Grenzflächenposition liegt

und an dem die gemittelte Dichte nahe $\varrho_{1,2}^*$ ist, betrachtet. Durch Entwicklung von $j(\varrho)$ um diesen Punkt ergibt sich:

$$j(\varrho + \Delta\varrho) = j(\varrho) + \frac{dj(\varrho)}{d\varrho}\Delta\varrho + \mathcal{O}((\Delta\varrho)^2) \quad (30)$$

$$\Delta\varrho = \frac{d\varrho(x_0)}{dx}(-\Delta x) + \mathcal{O}((-\Delta x)^2) \quad (31)$$

$$\text{mit } \frac{d\varrho(x_0)}{dx} \propto \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \quad (32)$$

Weiterhin wird angenommen, dass in der direkten Umgebung der Grenzfläche $\varrho_{1,2}^*$ nie ganz erreicht werden und somit $\frac{dj(\varrho_{L,R})}{d\varrho} \neq 0$ gilt. Werden zeitliche Fluktuationen durch einen Rauschterm $\eta(t)$ berücksichtigt, so lässt sich folgende Langevin-Gleichung zur Beschreibung der Grenzflächenposition erhalten:

$$\frac{dx}{dt} = -k \frac{x}{L^{\frac{3}{2}}} + \eta(t) \quad (33)$$

Theoretische Ergebnisse für Strom-Strom-Korrelationen im ASEP [4] legen nahe, dass $\eta(t)$ langreichweitig antikorreliert ist mit einer Korrelationsfunktion $C(\tau)$ mit folgenden Eigenschaften:

$$C(\tau) = \langle \eta(t)\eta(t+\tau) \rangle = -B\tau^{-\frac{4}{3}} \quad \text{für } \tau \rightarrow \infty, \quad (34)$$

$$\int_{\tau=0}^{\infty} C(\tau)d\tau = 0. \quad (35)$$

Hierbei ist $B > 0$ eine Konstante. Der Einfachheit halber wird angenommen, dass $\eta(t)$ ein stationärer Gaußscher Prozess ist. Eine solche Korrelation kann ein Wachstum $w_{\text{av}}^2(t) \propto t^{2-\frac{4}{3}}$ hervorrufen [1], das dem in den Simulationen beobachteten Wachstumsverhalten mit $w_{\text{av}}(t) = t^{\frac{1}{3}}$ entspricht.

Unter Einführung eines Potentials $V(x, L)$ kann Gleichung (33) auch in der Form

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial V(x, L)}{\partial x} + \eta(t) \quad (36)$$

$$\text{mit } V(x, L) = \frac{k}{2} \left(\frac{x}{L^{\frac{3}{4}}} \right)^2 \quad (37)$$

geschrieben werden.

8.1 Vergleich mit Simulationen

Die in den Simulationen gemessenen Positionen der Grenzfläche $\bar{x}(t)$ (siehe Abschnitt 5) werden im Folgenden analysiert, um die Beschreibung der stochastischen Bewegung der Grenzflächenposition mittels der Langevin-Gleichung (33) zu überprüfen. Zur Übersichtlichkeit wird $x = \bar{x}(t) - \frac{L}{2}$ geschrieben. Dazu wird die Drift $D^{(1)}(x)$ der Grenzflächenposition in Abhängigkeit von der aktuellen Position x bestimmt. Bei der Berechnung werden die folgenden Gleichungen verwendet [10]:

$$M^{(n)}(x, \tau) = \langle (X(t + \tau) - X(t))^n \rangle |_{X(t)=x}, \quad (38)$$

$$D^{(n)}(x) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{n! \tau} M^{(n)}(x, \tau). \quad (39)$$

Das Resultat der Berechnung von $D^{(1)}(x)$ ist in Abbildung 19 für $L = 4000$ dargestellt. Ein linearer Zusammenhang ist deutlich zu erkennen. Dies unterstützt die zuvor diskutierten Überlegungen.

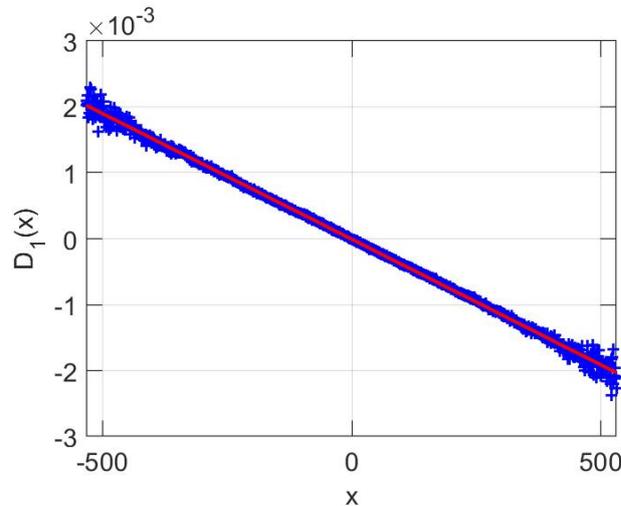


Abbildung 19: Die Drift $D^{(1)}(x)$ ist als Funktion von x aufgetragen. Eine lineare Regression (rote Linie) zeigt einen deutlichen linearen Zusammenhang.

Die Steigung $-\tilde{k}$ des linearen Zusammenhangs wird durch Regression für verschiedene L bestimmt. Nun kann die L -Abhängigkeit genauer untersucht werden. Dazu wird in Abbildung 20 \tilde{k} gegen L mit doppelt logarithmischer Skalierung aufgetragen.

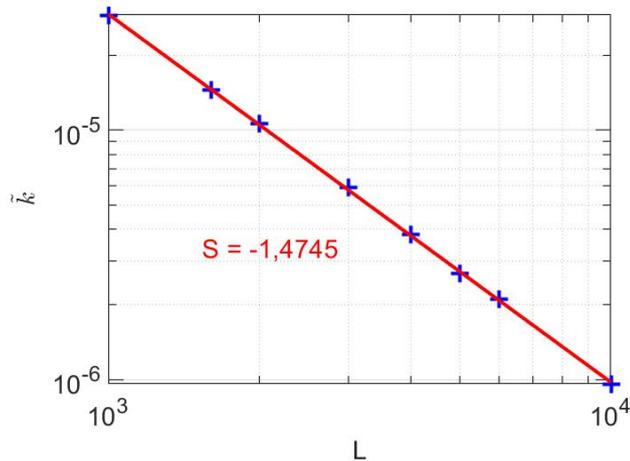


Abbildung 20: \tilde{k} ist als Funktion von L doppeltlogarithmisch aufgetragen. Eine lineare Regression (rote Linie) ergibt ein Potenzgesetz-Verhalten $\tilde{k} = \frac{k}{L^{1,4745}}$ mit einem Exponenten nahe $-\frac{3}{2}$.

Der Zusammenhang $\tilde{k} = \frac{k}{L^{\frac{3}{2}}}$ stimmt mit der Vermutung in Gleichung (33) überein. Weiterhin ist

$$k \simeq 0,9496$$

gefunden worden.

8.2 Integration der Langevin-Gleichung

Gleichung (36) wird unter Verwendung des zuvor bestimmten k numerisch integriert und mit den so erhaltenen $x(t)$ wird $w_{av}(t, L)$ berechnet. Das Resultat wird für $L = 1000$ in Abbildung 21 mit den TASEP-Simulationen verglichen. Dabei wird die Zeit der Langevin-Gleichung reskaliert, da sich diese bei den verwendeten Parametern etwa 3,6 mal so schneller entwickelt hat. Abgesehen davon gibt es allerdings eine sehr hohe Übereinstimmung mit den TASEP-Simulationen für mittlere und große Zeiten t .

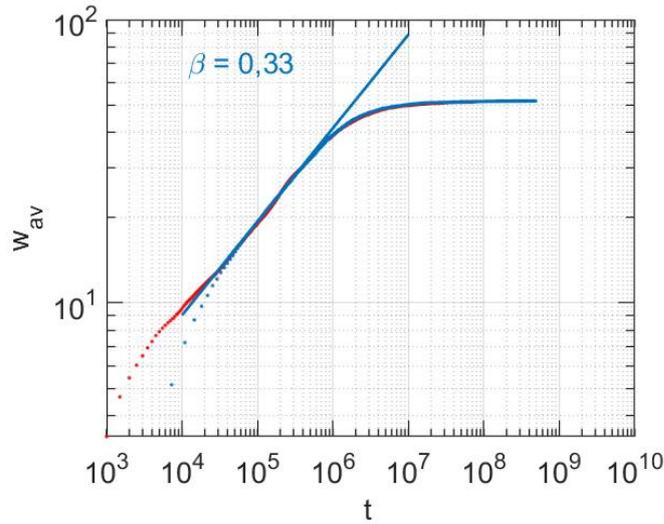


Abbildung 21: Grenzflächenbreite $w_{av}(t, L)$ als Funktion von t für $L = 1000$ aus den TASEP-Simulationen (rot) und aus der Lösung der Langevin-Gleichung (blau).

Bei der Variation von L kommt es allerdings zu Abweichungen von dem bei den TASEP-Simulationen gefundenen Skalierungsverhalten. Eventuell führt eine Änderung des Parameters B sowie der Standardabweichung der Störung zu besseren Ergebnissen. Allerdings ist es dabei vielleicht auch notwendig, k zu variieren, um den Geschwindigkeitsunterschied zwischen der Langevin-Gleichung und dem TASEP auszugleichen. Weiterhin könnte eine Änderung der Korrelationsfunktion $C(\tau)$ für kurze Zeiten notwendig sein.

9 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Fluktuationen der Grenzfläche zwischen zwei Phasen maximalen Stroms in einem sogenannten „totally asymmetric simple exclusion process“ (TASEP) mit repulsiver Nächster-Nachbar-Wechselwirkung untersucht. Die erwartete Skalierung der Grenzflächenbreite $w(t, L) = L^\alpha f(\frac{t}{L^z})$ mit $\alpha = \frac{3}{4}$, $\beta = \frac{1}{3}$ und $z = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{9}{4}$ sowie $f(x) \sim x^\beta$ für $x \ll 1$ und $f(x) \sim \text{konst.}$ für $x \gg 1$ konnte bestätigt werden. Weiterhin wurden Hinweise auf einen Bereich mit einem Wachstumsverhalten $\propto t^{\frac{1}{4}}$ für kleine Zeiten gefunden. Die $t^{\frac{1}{4}}$ -Abhängigkeit wird bei ähnlichen Systemen durch die Mittelung über verschiedenen Anfangskonfigurationen hervorgerufen [9, 11]. Eventuell ist das auch bei dem betrachteten System der Fall. Dies müsste aber noch weiter untersucht werden. Weiterhin könnte es in diesem Zusammenhang nützlich sein, das Verhalten von $w(t, L)$ bei einzelnen Simulationen zu betrachten, d. h. ohne eine Mittelung durchzuführen.

Es wurde eine näherungsweise analytische Beschreibung für die zeitliche Entwicklung des Dichteprofiles $\rho(x, t)$ untersucht. Diese liefert bei Mittelung über lange Zeiträume eine sehr gute Übereinstimmung mit den TASEP-Simulationen. Allerdings gibt es große Abweichungen der mittleren Grenzflächenbreite $w_{\text{av}}(t, L)$ zur Zeit t von den Simulationen des TASEPs. In der Gleichung treten zwei freie Parameter auf und eine weitere Optimierung dieser Parameter könnte zu besseren Ergebnissen führen. Dazu ist allerdings ein sehr hoher Rechenaufwand notwendig. Alternativ können die Parameter auch aus grundlegenden Überlegungen zum TASEP hergeleitet werden. Um das Verhalten von $w_{\text{av}}(t, L)$ zu erklären, wäre es weiter notwendig, die Skalenrelationen aus der Differentialgleichung herzuleiten.

Weiterhin wurde eine Langevin-Gleichung für die stochastische Bewegung der Grenzflächenposition aufgestellt. Eine Analyse der TASEP-Simulationen hat die angenommene Drift und deren Skalierungsverhalten bestätigt. Zusätzlich gibt es Hinweise darauf, dass der Rauschterm $\eta(t)$ langreichweitig antikorreliert ist.

Literaturverzeichnis

- [1] Ronny Bartsch et al. “Statistical analysis of fluctuations in the ECG morphology”. In: *Physica A* 354 (2005), pp. 415–431.
- [2] H. van Beijeren. “Fluctuations in the Motions of Mass and of Patterns in One-Dimensional Driven Diffusive Systems”. In: *Journal of Statistical Physics* 63 (1991), pp. 47–58.
- [3] Marcel Dierl, Mario Einax, and Philipp Maass. “One-dimensional transport of interacting particles: Currents, density profiles, phase diagrams, and symmetries”. In: *Physical Review E* 54.18 (2013), pp. 2026–2029.
- [4] Patrik L. Ferrari and Herbert Spohn. “On Time Correlations for KPZ Growth in One Dimension”. In: *SIGMA* 12.74 (2016).
- [5] Shamik Gupta. *Dynamics of fluctuations in driven diffusive systems: finite-size effects*. 2008.
- [6] Dominik Lips, Artem Ryabov, and Philipp Maass. “Nonequilibrium Transport and Phase Transitions in Driven Diffusion of Interacting Particles”. In: *Zeitschrift für Naturforschung A* 75.5 (2020), pp. 449–463.
- [7] David Locher. *Grenzflächenfluktuation zwischen Phasen extremalen Stroms in getriebenen Gittergasen*. 2018.
- [8] Philipp Maass, Marcel Dierl, and Matthias Wolff. *On phase transitions in biased diffusion of interacting particles*.
- [9] S. N. Majumdar and Mustansir Barma. “Tag diffusion in driven systems, growing interfaces, and anomalous fluctuations”. In: *Physical Review B* 44.10 (1991), pp. 5306–5308.
- [10] Philip Rinn et al. “The Langevin Approach: An R Package for Modeling Markov Processes”. In: *Journal of open research software* 4 (2016).
- [11] T. Sasamoto. “Exact results for the 1D asymmetric exclusion process and KPZ fluctuations”. In: *The European Physical Journal B* 64 (2008), pp. 373–377.
- [12] G. Schütz and E. Domany. “Phase Transitions in an Exactly Soluble One-Dimensional Exclusion Process”. In: *Journal of Statistical Physics* 72 (1993), pp. 277–296.