1) مقدمه

۱-۱) حالت غیر تعادل چیست؟

۲-۱) دینامیک غیر تعادل.

۳-۱) نمونه‌هایی از حالت‌های غیر تعادل.

۲) مروری بر سیستم‌های پخش و واکنش

۱-۲) فرآیند ASEP

۱-۱-۲) ASEP با شرایط مرزی پریودیک

۲-۱-۲) ASEP با شرایط مرزی باز

۲-۲) روش میدان متوسط

۱-۲-۲) روش لاکس ـ حل و ویتهام و امواج جنبشی برای تعیین نمودار فاز در ASEP

۲-۲-۲) تعیین پروفایل چگالی.

۳-۲) حل دقیق ASEP با شرایط مرزی باز [مروری اجمالی مفاهیم و نتایج]

۱-۳-۲) حالت ضرب ماتریسی برای غیر تعادل

۲-۳-۲) تابع پارش غیر تعادل و گذار فاز

۳-۳-۲) مقایسه بین حالت‌های ضرب ماتریسی برای تعادل و غیر تعادل

۴-۳-۲) مقایسه بین حالت‌های ضرب ماتریسی برای زنجیره‌های اسپینی و سیستم‌های استوکاستیک

۴-۲) موتورهای ذرات نوع دوم.

۲-٤-۱) ذرات ناخالصی

۳) حل تفصیلی و دقیق ASEP با شرایط مرزی باز.

۳-۱) جبر مربوط به ASEP

۳-۲) محاسبهٔ تابع پارش

۳-۱-۱) محاسبهٔ تابع پارش با وسیله مرتب کردن

۳-۱-۲) محاسبه تابع پارش با وسیله پیدا کردن نمایش خاص

۳-۱-۳) روش تابع مولد

۳-۳) محاسبهٔ تابع چگالی با روش مرتب کردن

۳-٤) تجزیه تحلیل مجانبی جریان و چگالی

۳-۵) شکل دقیق دیاگرام فاز

۳-۶) ارتباط با گذارهای فاز تعادلی.

۱) مقدمه

۱-۱) حالت عدم تعادل چیست؟

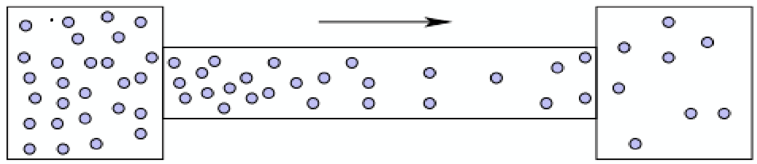


Figure 1. A channel held out of equilibrium through the application of a chemical potential gradient. It is anticipated that a nonequilibrium steady state will be reached in which particles flow from one reservoir to another at a constant rate.

حالت تعادل : Gibbs-Boltzman.

اصل تساوی احتمالات.

در حالت عدم تعادل هیچ اصل کلی وجود ندارد. ← ماکروسکوپی / میکروسکوپی

۱-۲) دینامیک عدم تعادل.

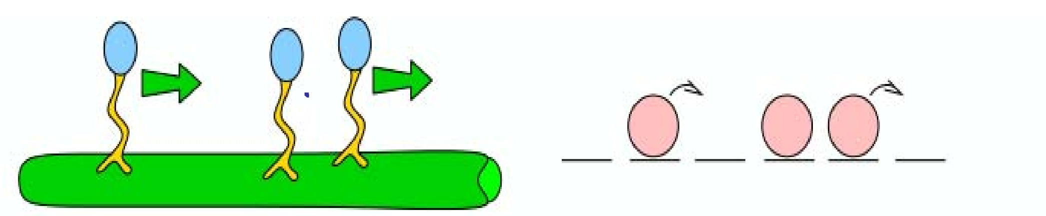


Figure 2. Kinesins attached to a microtubule that move in a preferred direction by extracting chemical energy from the environment. At a mesoscopic level, this can be modelled as a stochastic process in which particles hop along a one-dimensional lattice as shown.

a) Hopping of classical particles

b) Any queing process

c) Traffic Flow

d) Surface Growth

$$\frac{\partial P(c,t)}{\partial t} = \underline{\sum_{c'} W(c \leftarrow c') P(c',t)} - P(c,t) \sum_{c'} W(c' \leftarrow c)$$

۱-۳) نمونه‌هایی از حالت‌های پایا

a) Gibbs-Boltzmann

$$P(c) \propto e^{-\beta E(c)}$$

اصل توازن ظریف

$$P(c)\, W(c' \leftarrow c) = P(c')\, W(c \leftarrow c')$$

← نبود جریان و برگشت‌پذیری.

b) حالت‌های مانای ضربی

$$P(C) = P_1(n_1) P_2(n_2) \dots P_N(n_N).$$

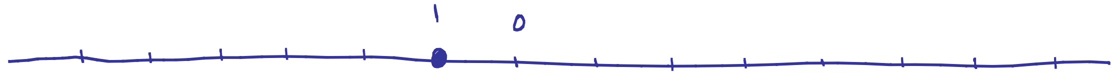
این نوع حالت‌ها تحت شرایط خیلی خاصی بوجود می‌آیند. مثلاً در مدل‌های با برد صفر:

Zero Range Process.

c) حالت‌های ضرب ماتریسی

$$P(c) = \langle W | A_{i_1} A_{i_2} \dots A_{i_N} | V \rangle .$$

۲) مروری بر سیستم‌های پخش و واکنش



Single species processes: short Range (Nearest neighbor interactions)

there are 12 possible elementary moves:

$00 \to 00$ Diagonal $\qquad 01 \to 00$

$00 \to 01 \qquad 01 \to 01$ Diag.

$00 \to 10 \qquad 01 \to 10$ hopping to the left

$00 \to 11$ pair Creation $\qquad 01 \to 11$

$10 \to 00 \qquad 11 \to 00$ pair annihilation

$10 \to 01$ hopping to the right $\qquad 11 \to 01$ Coalescence to the right

$10 \to 10 \qquad 11 \to 10$ " to the left

$10 \to 11 \qquad 11 \to 11$ Diagonal.

$$\mathbb{P}(n_1, n_2, \ldots, n_N, t) \equiv P(c,t)$$

* هرکدام از فرآیندها با نرخ مشخص رخ دهد. ←

** فرآیندها با چند نوع ذره نیز قابل بررسی هستند. ←

$AB \to BB$

$AB \to \phi\phi$

$A\phi \to \phi A$ etc. etc.

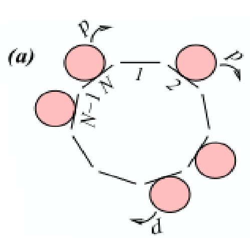
*** Boundary Induced phase Transitions.

**** هم چنین می‌توان فرآیندهایی که شامل نقص در شبکه هستند مطالعه کرد.

***** تمامی این فرآیندها در ابعاد بالاتر نیز قابل مطالعه هستند.

Asymmetric Simple Exclusion Process

۱-۲) فرآیند ASEP



۲-۱-۱) ASEP با شرایط مرزی پریودیک

برای این سیستم ابتدا نشان خواهیم داد که حالت پایا بسیار ساده است.

تمام حالت‌های مجاز هم‌احتمال هستند.

اگر تعداد N سایت در زنجیره وجود داشته باشد، و تعداد M ذره در حلقه وجود داشته باشد. این ذرات می‌توانند به $\binom{N}{M} = \frac{N!}{M!\,(N-M)!}$ طریق در سایت‌های مختلف قرار بگیرند. می‌خواهیم ببینیم جریان در این حالت پایا چقدر است؟ دقت کنید که هر کدام از حالت‌ها، با احتمال $\frac{1}{\binom{N}{M}}$ اشغال می‌شوند.

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle n_k\rangle = J_{k-1} - J_k$$

$$\langle n_k\rangle = \sum_{n_1, n_2, \ldots n_{k-1}, n_{k+1}, \ldots n_N} P(n_1, n_2, \ldots n_{k-1}, 1, n_{k+1}, \ldots n_N) = P(n_k = 1).$$

$$J_{k-1} = \lambda P(n_{k-1}=1, n_k=0) = \lambda \langle n_{k-1}(1-n_k)\rangle$$

$$J_k = \lambda P(n_k=1, n_{k+1}=0) = \lambda \langle n_k(1-n_{k+1})\rangle$$

$$\rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial t}\langle n_k\rangle = \lambda\langle n_{k-1}(1-n_k)\rangle - \lambda\langle n_k(1-n_{k+1})\rangle}$$

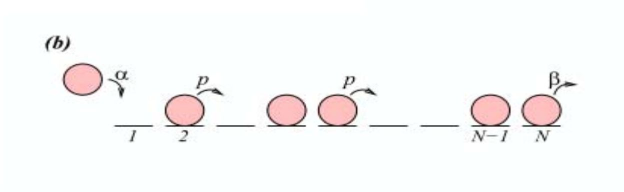
Now we can Calculate $\langle n_k(1-n_{k+1})\rangle$ from our uniform probability distribution:

$\langle n_k(1-n_{k+1})\rangle =$ احتمال این که سایت n_k پر و سایت $k+1$، خالی باشد $=$

$=$ تعداد این نوع حالت‌ها $\times$ احتمال هر حالت $= \binom{N-2}{M-1} \times \frac{1}{\binom{N}{M}}$

$$= \frac{(N-2)!}{(M-1)!\,(N-M-1)!}\,\frac{M!\,(N-M)!}{N!} = \frac{M(N-M)}{N(N-1)} \Rightarrow J = \lambda\,\frac{M}{N}\,\frac{N-M}{N-1}$$

for large $N \rightarrow$ $J = \lambda\rho(1-\rho)$



۲-۱-۲) ASEP با شرایط مرزی باز

The Basic questions :

1) what is the phase diagram ?

2) How each phase is characterized ?

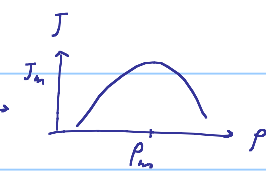
3) Current, density profile, correlations ...

۲-۲) روش میدان متوسط

۱-۲-۲) روش لایت‌هیل و ویتهام و امواج جنبشی

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

Basic Assumptions : $\begin{cases} J = J(\rho) \\ J \text{ has a maximum} \rightarrow \end{cases}$



$(1) \rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{dJ}{d\rho}\frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \qquad \frac{dJ}{d\rho} = v_g(\rho) \qquad v_g = \text{group velocity.}$

$\rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + v_g(\rho)\frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \longrightarrow \text{Solution (Implicit)} \Rightarrow \rho(x,t) = f(x - v_g(\rho)t)$

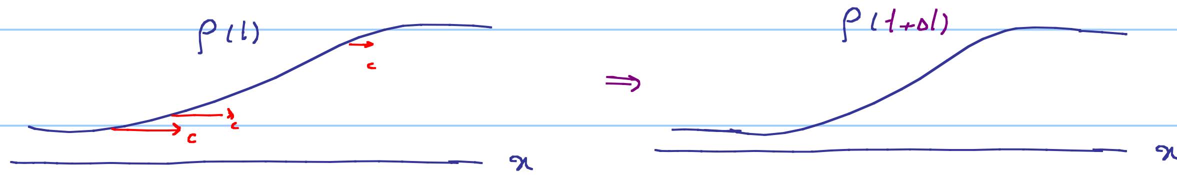
$\rho(x,0) = f(x). \qquad \text{Velocity of particles} = \frac{J}{\rho} =: c$

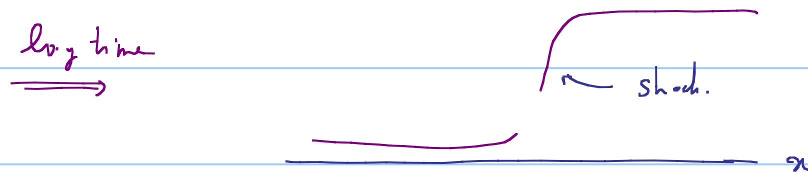
So we have two velocities: $\begin{cases} c = \frac{J}{\rho} = \text{velocity of particles.} \\ v_g = \frac{dJ}{d\rho} = \text{velocity of wave.} \end{cases}$

$$v_g(\rho) = \frac{dJ}{d\rho} = \frac{d}{d\rho}(c\rho) = \frac{dc}{d\rho}\rho + c$$

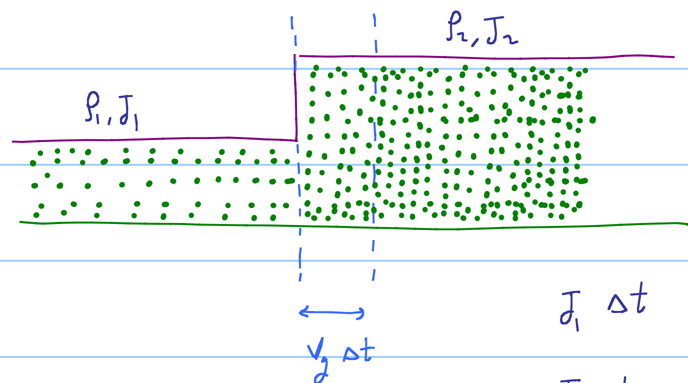
So if $\frac{dc}{d\rho} < 0$ (as we expect intuitively) $\Rightarrow v_g(\rho) < c.$

this leads to the formation of shocks: How?





what is the velocity of the shock wave?



$J_1 \Delta t$ = جریان ذرات به داخل ناحیه

$J_2 \Delta t$ = جریان ذرات خارج شده از ناحیه

$(\rho_2 - \rho_1) V_s \Delta t$ = تغییر چگالی ذرات

$\rightarrow \quad (J_1 - J_2)\Delta t = -(\rho_2 - \rho_1) V_s \Delta t$

$$V_s = \frac{J_1 - J_2}{\rho_1 - \rho_2}$$

shock velocity

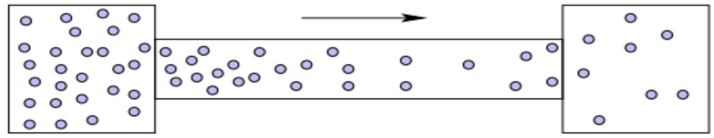
for $J = \rho(1-\rho) \rightarrow$
$$\boxed{\begin{cases} V_g = 1 - 2\rho \\ V_s = 1 - \rho_1 - \rho_2 \end{cases}}$$

از این رابطه می‌توانیم استفاده کنیم و دیاگرام فاز ASEP را به طور تقریبی حدس بزنیم.

۲-۲-۲) تعیین دیاگرام فاز

شکل زیر را در نظر بگیرید:

چگالی منبع α چگالی منبع $1-\beta$



Note: $J_0 = \langle n_0 (1-n_1) \rangle = \langle \alpha (1-0) \rangle = \alpha$.
also: $J_N = \langle n_N (1-n_{N+1}) \rangle = \langle 1 (1-(1-\beta)) \rangle = \beta$ $\Big\}$ ← Justification

→ We have: $V_0 = 1-2\alpha$ $\qquad V_N = 1-2(1-\beta) = 2\beta-1$

سرعت موج اگر از منبع طرف چپ را می‌یابد. سرعت موجی که از طرف راست برابر می‌یابد.

دقت کنید جهت قراردادی هر دو سرعت به طرف راست در نظر گرفته شده است.

Case 1) $\alpha < 1/2, \; \beta < 1/2 \longrightarrow \overrightarrow{V_0}, \; \overleftarrow{V_N}$

دو موج در وسط به هم می‌رسند و تشکیل یک دیوار شوک می‌دهند. سرعت این دیواره برابر است با:

$$V_s = 1-\alpha-(1-\beta) = \beta-\alpha$$

→ if $\beta > \alpha \Rightarrow \overrightarrow{V_s} \Rightarrow$ LD. تمام محیط از چگالی α پر می‌شود.

if $\beta < \alpha \Rightarrow \overleftarrow{V_s} \Rightarrow$ HD. تمام محیط از چگالی $1-\beta$ پر می‌شود.

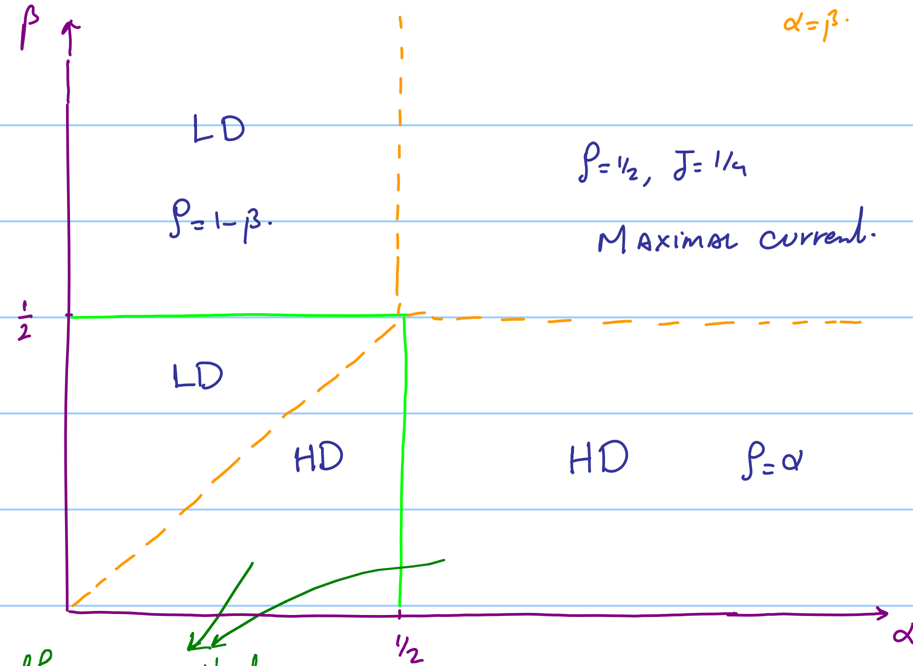
LD = low density $\equiv (\rho < 1/2)$.

HD = High density $\equiv (\rho > 1/2)$

Case 2) $\alpha < 1/2, \; \beta > 1/2 \Rightarrow \overrightarrow{V_0}, \overrightarrow{V_N} \Rightarrow$ (LD) تمام محیط از چگالی α پر می‌شود.

$\alpha > 1/2, \; \beta < 1/2 \Rightarrow \overleftarrow{V_0}, \overleftarrow{V_N} \Rightarrow$ (HD). تمام محیط از چگالی $1-\beta$ پر می‌شود.

Case 3) $\alpha > 1/2, \; \beta > 1/2 \Rightarrow \overleftarrow{V_0}, \overrightarrow{V_N} \Rightarrow$ (exact solution $\Rightarrow \rho = 1/2, J = 1/4$)



The difference is that there is a shock in the left HD phase.

۲-۲-۳) تعیین پروفایل چگالی.

حل : $\quad \dfrac{\partial \langle \tau_i \rangle}{\partial t} = \langle \tau_{i-1} (\tau_i - 1) \rangle - \langle \tau_i (\tau_{i+1} - 1) \rangle = J_{i-1} - J_i$

in the mean field approximation we have: $\langle \tau_i \tau_{i+1} \rangle = \langle \tau_i \rangle \langle \tau_{i+1} \rangle$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \rho_{i-1} (1-\rho_i) - \rho_i (1-\rho_{i+1}).$$

In the steady state we have: $J_i \equiv J = \rho_i (1-\rho_{i+1}) \quad \forall i$

So $\rightarrow \quad \rho_i (1-\rho_{i+1}) = J$

So from this equation if we have J, and say ρ_0, we can obtain all the other ρ_i's one by one:

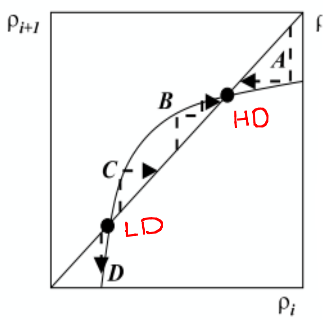
$$\rho_{i+1} = 1 - \frac{J}{\rho_i}$$

to analyse this, consider the equation $\quad f(x) = 1 - \dfrac{J}{x}.$

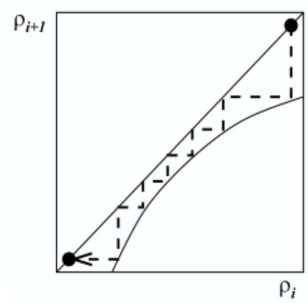
we have $f(0) = -\infty$, $f(J) = 1$, $f(\infty) = 1$ also $\frac{df}{dx} = 1 + \frac{J}{x^2} > 0$ for $J > 0$. let's ask if $f(x) = x$ has a solution.

$$f(x) = x \longrightarrow x = 1 - \frac{J}{x} \rightarrow x^2 - x + J = 0 \rightarrow x = \frac{1 \pm \sqrt{1-4J}}{2}$$

$$\rightarrow \begin{cases} x_1 = \frac{1-\sqrt{1-4J}}{2}, \quad x_2 = \frac{1+\sqrt{1-4J}}{2} & J < 1/4 \\ \text{No real solution.} & J > 1/4 \end{cases} \rightarrow$$



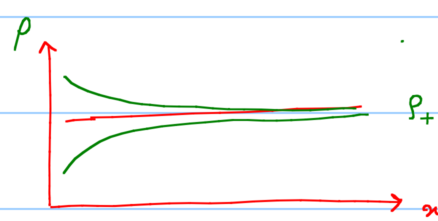
$J < 1/4$.



$J > 1/4$.

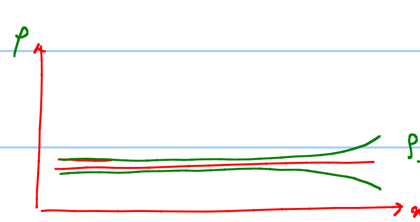
Also note that at the boundaries, we have: $\begin{cases} J = \alpha \\ J = 1-\beta \end{cases}$

In HD we have:



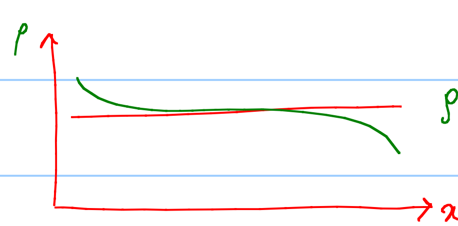
$\rho_+ = \begin{cases} \alpha \ ? \\ 1-\beta \ ? \end{cases}$

In LD we have



$\rho_- = \begin{cases} \alpha \ ? \\ 1-\beta \ ? \end{cases}$

In MC, we have



$\rho = 1/2$