Zellularautomaten simulieren biologische Bewegung

Ansgar Kirchner

Diplomarbeit
Institut für theoretische Physik

Universität zu Köln

Juni 1999

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Ein weites Feld von dynamischen Nichtgleichgewichtssystemen mit vielen Freiheitsgraden ist in den letzten Jahren mit Hilfe von Zellularautomaten (CA) untersucht worden. Hier sind vor allem Probleme aus dem Bereich der Verkehrsdynamik [1] und der granularen Materie [2, 3] zu nennen.
Darüber hinaus sind vor allem Vielteilchensysteme mit biologisch motivierten Wechselwirkungen Gegenstand des aktuellen Interesses. Dabei werden die mittels CA realisierten Modelle zur Beschreibung verschiedenster Phänomene herangezogen:

- Schwarmbildung [4, 5, 6, 7]
- Aggregation und Clusterbildung [8, 9],
- Stoff- und Teilchentransport [10, 11],
- Virologie und Immunologie [12],
- Bildung und Ausbreitung von Krankheiten [13],
- biologische Musterbildung [14].

In dieser Arbeit soll sich vor allem mit Problemen zur Schwarm- und Aggregationsbildung beschäftigt werden. Bei diesen Phänomenen kommt es stets zu zeitweiligem kollektiven Verhalten einer großen Menge unabhängiger biologischer Individuen. Abb. 1.1 zeigt zum Beispiel die Ausbildung verschiedener Aggregationsmuster von Bakterienkolonien bei unterschiedlichen Nahrungskonzentrationen. Weitere Beispiele für derartige Phänomene sind:

- Lebenszykel vieler Mikroorganismen: in Bakterienkolonien wechseln sich Perioden mehr oder weniger unabhängiger Bewegung einzelner Zellen mit Perioden kollektiver Bewegung und Aggregation ab. Der Wechsel dieser Perioden kann durch unterschiedliche Faktoren wie Nahrungsmittelkonzentration, Teilchendichte und chemische Botenstoffe realisiert werden [15, 16].
- Schulenbildung in Fischschwärmen und das kollektive Verhalten von Säugetierschwärmen (Abb. 1.2) [17].
- Schwarmbildung von Vögeln und Insekten.

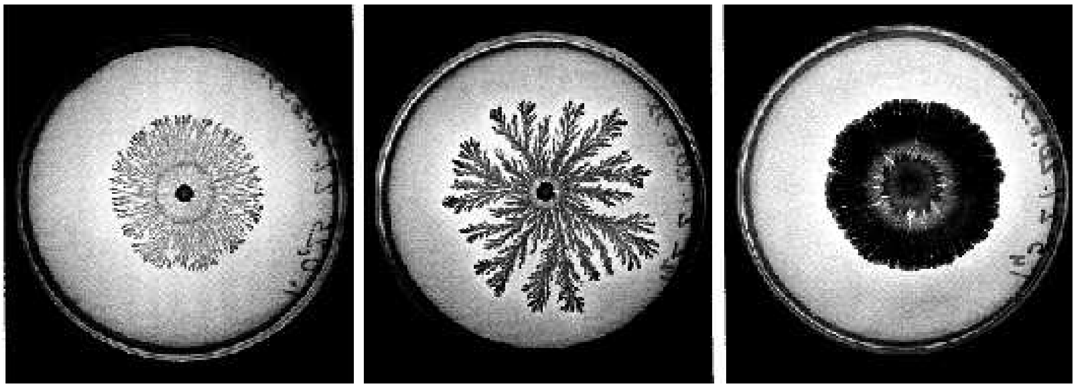


Abbildung 1.1: *Paenibacillus dendritiformis*, unterschiedliche Nahrungsmittelkonzentration (aus [18])

- Wanderung und Aggregation von Zellen [18].

Solche und ähnliche Phänomene wurden in den letzten Jahren einerseits mit Hilfe von kontinuierlichen Modellen und feldtheoretischen Methoden [19, 20], andererseits mittels Gittergas-Zellularautomaten [4, 6] untersucht. In beiden Fällen werden Schwarm- und Aggregationsbildung als dynamische Phasenübergänge beschrieben, die von kritischen Parametern wie der Organismendichte oder sogenannten Sensitivitätsparametern gesteuert werden. Für einige der untersuchten Modelle wurden Skalentheorien entwickelt und mit Hilfe von Renormierungsgruppentheorie kritische Exponenten bestimmt. Ferner lassen sich diese Modelle unter bestimmten Voraussetzungen auf herkömmliche Modelle der Festkörperphysik, wie Ising-, XY- und Heisenbergmodelle projizieren.
Die in dieser Arbeit vorgestellten Modelle werden, wie bereits angedeutet, ausschließlich in Form von Zellularautomaten realisiert und mit Methoden der statistischen Physik untersucht. Hierbei ist eine experimentelle Tatsache von großem Vorteil:
Schwarm- und Aggregationsbildung wird in vielen Fällen durch lokale Wechselwirkung zwischen den Organismen kontrolliert, und weniger durch externe Informationsträger wie chemische Botenstoffe.
Aufgund des lokalen Charakters der Wechselwirkungen ergibt sich, daß CA in diesen Fällen besonders gut zur Beschreibung der auftretenden Phänomene geeignet sind. In der Tat existieren bereits etliche CA, die auf dem Prinzip der lokalen Wechselwirkung basieren [6, 7, 4, 5, 8]. Die Organismenbewegung wird hierbei durch diskrete Geschwindigkeitssprungprozesse realisiert, das heißt, die Teilchen bewegen sich auf vorgegebenen Gittergeometrien über stückweise lineare Strecken in diskreten Zeitintervallen. Die Entscheidung ob und in welche Richtung sich ein Organismus bewegt, wird in jedem Zeitschritt mit Hilfe spezieller Regeln getroffen, die den lokalen Wechselwirkungscharakter repräsentieren. In vielen Fällen sind diese CA mit sehr komplexen Regeln versehen. Auch lassen sich Mehrfachbesetzungen einzelner Gitterplätze nicht vermeiden. Dies nimmt den Modellen einiges von ihrer Anwendbarkeit auf realistische biologische Systeme. Daher soll in dieser Arbeit ein einfacher, neuer CA eingeführt und untersucht werden, der Mehrfachbesetzung von Gitterplätzen vermeidet und auf dem Prinzip der lokalen Wechselwirkung zur Beschreibung von

Abbildung 1.2: Schwarmbildung von Fischen

Schwarm- und Aggregationsphänomenen beruht. Infolge experimenteller Untersuchungen lassen sich zwei Hauptarten lokaler Wechselwirkung angeben:

1. Konzentrationsabhängige Wechselwirkung: das heißt, die Bewegung der Organismen wird gesteuert durch lokale Organismendichtegradienten.

2. Orientierungsabhängige Wechselwirkung: das heißt, Organismen richten ihre Bewegungsrichtung nach der mittleren Orientierung der Organismen ihrer näheren Umgebung aus.

[4, 5, 8, 9] beschreibt einen CA, der sowohl konzentrations- als auch orientierungsabhängige Wechselwirkung enthält. In [6] und [7] werden orientierungsabhängige CA zur Schwarmbildung untersucht.
Der in dieser Arbeit untersuchte CA zur Aggregationsbildung basiert auf der Grundlage der konzentrationsabhängigen lokalen Wechselwirkung. Das Modell wird inKapitel 2 eingeführt und anhand einfacher Beispiele verdeutlicht. In Kapitel 3 und Kapitel 5 werden dann seine Eigenschaften untersucht.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit ist die Untersuchung eindimensionaler Stoff- und Teilchentransportphänomene. Auch diese Thematiken wurden in letzter Zeit verstärkt untersucht. Als Beispiele lassen sich angeben:

- Single-file-Diffusion in Ionenkanälen (Abb. 1.3) [11],
- biologische Ratschen und Motoren [10],
- Biopolymerisation.

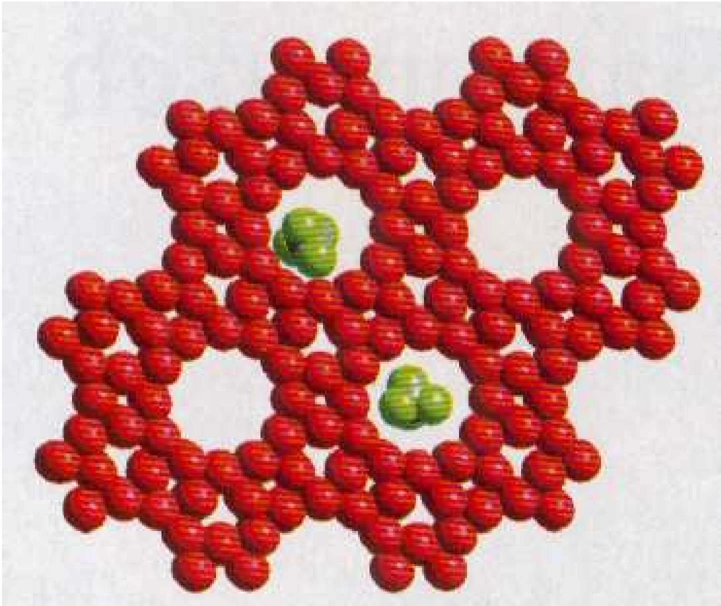


Abbildung 1.3: Modell des Zeoliths $AIPO_4 - 5$ mit darin befindlichem CF_4-Molekülen. Die CF_4-Moleküle können sich auf ihrem Weg durch die Kanäle des $AIPO_4 - 5$ nicht überholen; sie unterliegen der Single-file-Diffusion (aus [11]).

Wiederum wurden zur Beschreibung solcher Probleme verstärkt CA eingesetzt. Hier ist vor allem der ASEP zu nennen, für den es eine Reihe verschiedener Interpretationsmöglichkeiten aus obigem Bereich gibt [21, 22].
Durch eine Abwandlung der Regeln des in Kapitel 2 eingeführten Modells erhält man für seine eindimensionale Version einen CA, den man zur Interpretation obiger Phänomene einsetzen kann. Die Definition der neuen Regeln wird in Abschnitt 3.6 geliefert. Anschließend werden an selber Stelle quantitative Transporteigenschaften des CA untersucht.
Ferner wird in Kapitel 4 ein neues, einfaches Modell zu eindimensionalen Transport- und Diffusionsphänomenen eingeführt, dessen Untersuchung sich daran anschließt. Die auftretenden Probleme werden mit Hilfe von Computersimulationen und mittels analytischer Methoden behandelt. Neben analytischen Näherungsverfahren können in Spezialfällen auch exakte Lösungsmethoden angewandt werden.
Abschließend werden in Kapitel 6 sämtliche Untersuchungen diskutiert und Ausblicke auf sich eventuell anschließende Arbeiten gegeben.

Kapitel 2

Definition des Modells

Man betrachtet N Teilchen auf einem d-dimensionalen hyperkubischen Gitter der Größe L^d. Mit „Teilchen“ist eine beliebige biologische Einheit wie Molekül, Zelle oder Organismus gemeint. Der Automat basiert auf dem Grundprinzip der lokalen Wechselwirkung. Die Teilchenbewegung findet bevorzugt in Richtung höherer lokaler Dichten statt. Die Verallgemeinerung auf andere Gittergeometrien, wie zum Beispiel Hexagonalgitter, ist evident. Die Teilchendichte ergibt sich zu $\rho = \frac{N}{L^d}$. Sie ist eine Erhaltungsgröße. Es gelten periodische Randbedingungen. Die N Teilchen werden am Anfang zufällig auf das Gitter verteilt. Dabei gilt „hard-core“-Exklusion, das heißt, ein Gitterplatz kann stets nur von maximal einem Teilchen besetzt werden. Die Zeitentwicklung des Modells vollzieht sich in mehreren Schritten:

1. Man greift zufällig ein Teilchen heraus: die Dynamik wird mittels *zufällig sequentiellem Update* realisiert. Hierdurch läßt sich in einfacher Weise das fermionische Besetzungszahlprinzip des Modells gewährleisten. Bei paralleler Dynamik hingegen wäre die „hard-core“-Exklusion mit den einfachen Regeln des Modells nicht ohne weiteres zu gewährleisten.

2. Das Teilchen misst die *lokale Dichte* D_i seines eigenen Platzes i und die *lokalen Dichten* in der Umgebung seiner unbesetzten nächsten Nachbar-Plätze D_j. Die *lokale Dichte* D_i des ausgewählten Teilchens ist definiert als:

$$D_i = \frac{\sum\limits_{\langle l \rangle} \eta(l)}{2d} \quad , \tag{2.0.2.1}$$

mit:

$$\langle l \rangle := \text{Summe über alle nächsten Nachbarn,}$$
$$\eta(l) := \begin{cases} 0 & \text{freier Platz,} \\ 1 & \text{besetzter Platz,} \end{cases}$$
$$2d := \text{Anzahl der nächsten Nachbarn.}$$

Sind sämtliche nächsten Nachbarplätze des Teilchens besetzt, hat es also die lokale Dichte $D_i = 1$, so ist wegen des fermionischen Besetzungszahlprinzips

keine Bewegung des Teilchens möglich. In diesem Fall wird sofort ein anderes Teilchen zufällig ausgewählt.
Die lokale Dichte der unbesetzten nächsten Nachbarplätze bestimmt sich aus den virtuellen Konfigurationen, die enstehen, wenn sich das Teilchen auf den entsprechenden freien Nachbarplatz bewegt hat. Für die lokale Dichte D_j der unbesetzten nächsten Nachbarplätze ergibt sich somit:

$$D_j = \frac{\sum\limits_{\langle l \rangle} \tilde{\eta}(l)}{2d} \quad . \tag{2.0.2.2}$$

Hierbei ist:

$$\tilde{\eta}(l) := \begin{cases} \eta(l) & \text{für} \quad l \neq i, \\ 0 & \text{für} \quad l = i. \end{cases}$$

3. Der Platz des ausgewählten Teilchens und sämtliche unbesetzten Nachbarplätze werden mit Wahrscheinlichkeiten p_i versehen. Diese Wahrscheinlichkeiten p_i ergeben sich aus den *lokalen Dichten* D_i nach folgender Formel:

$$p_i = \frac{\exp(kD_i)}{\sum\limits_l \exp(kD_l)} \quad . \tag{2.0.2.3}$$

Der kontinuierliche Parameter

$$k \in [0, \infty[$$

wird als *Sensitivitätsparameter* bezeichnet. In der Normierung

$$Z = \sum_m \exp(kD_m)$$

ist über alle in Frage kommenden lokalen Dichten zu summieren. Sie ist so gewählt, daß die Summe über alle p_i gleich eins wird. Der Sensitivitätsparameter k fungiert als eine inverse Temperatur.

4. Im letzten Schritt bewegt sich das Teilchen nun mit der Wahrscheinlichkeit p_i auf den zu diesem Gewicht gehörenden Platz. Dies schließt die Möglichkeit für das Teilchen mit ein, auf seinem ursprünglichen Platz zu verbleiben. Hieraus wird klar, in welcher Weise der Sensitivitätsparameter k den Grad lokaler Wechselwirkungsstärke kontrolliert.

   - Für $k = 0$ sind alle Gewichte p_i, unabhängig von den lokalen Dichten, gleich groß und das Modell beschreibt eine reine Zufallsbewegung der Teilchen auf dem Gitter, unter Berücksichtigung der fermionischen Besetzungszahlen.
   - Für $k \to \infty$ wird die Tendenz der Teilchen, sich in Richtung höherer lokaler Dichten zu bewegen, immer stärker zu.

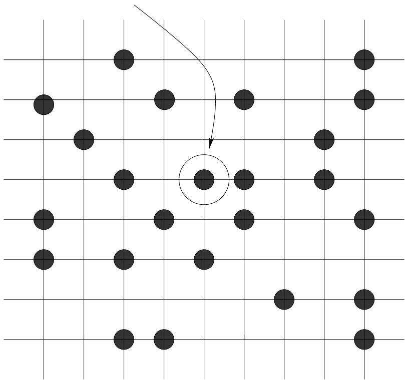


Abbildung 2.1: zufällig sequentieller Update

Dieser Zeitentwicklungsprozeß soll nun anhand eines konkreten Beispiels verdeutlicht werden, es gelte $d = 2$.

1. Ein Teilchen wird zufällig ausgewählt (Abb. 2.1).
   Der Platz dieses Teilchens sei mit i bezeichnet. Hieraus ergibt sich folgende Notation für die nächsten Nachbarplätze :

   - Platz $i + 1$ für den rechten Nachbarplatz,
   - Platz $i - 1$ für den linken Nachbarplatz,
   - Platz $i - L$ für den oberen Nachbarplatz,
   - Platz $i + L$ für den unteren Nachbarplatz.

2. Bestimmung der lokalen Dichten (Abb. 2.2):

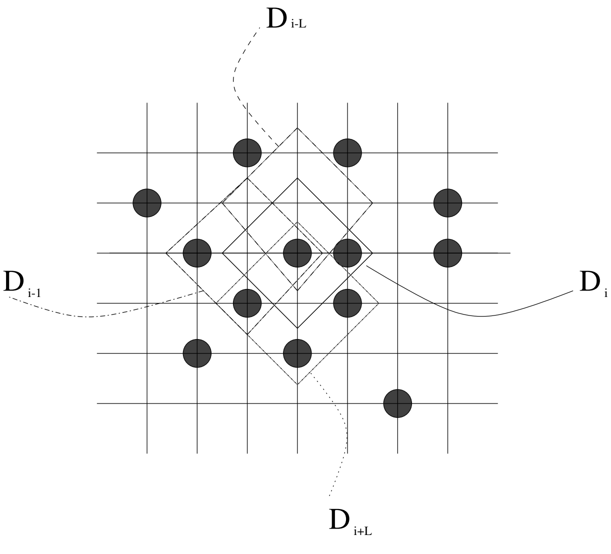


Abbildung 2.2: lokale Dichten

Der rechte Nachbarplatz $i + 1$, des auf dem Platz i sitzenden zufällig ausgewählten Teilchens, ist besetzt. Daher erübrigt es sich, für diesen Platz eine lokale Dichte zu bestimmen. Die lokale Dichte des Teilchens am Platz i ergibt sich zu:

$$D_i = \frac{1}{4} \quad .$$

Würde sich das Teilchen von Platz i auf einen der freien Plätze $i-1, i-L, i+L$ bewegen, so hätte es dort die lokalen Dichten:

$$\begin{aligned} D_{i-1} &= \frac{1}{2} \quad , \\ D_{i-L} &= 0 \quad , \\ D_{i+L} &= \frac{3}{4} \quad . \end{aligned}$$

3. Es folgt somit für die Gewichte:

$$\begin{aligned} p_i &= \frac{\exp(k\frac{1}{4})}{Z} \quad , \\ p_{i-L} &= \frac{1}{Z} \quad , \\ p_{i-1} &= \frac{\exp(k\frac{1}{2})}{Z} \quad , \\ p_{i+L} &= \frac{\exp(k\frac{3}{4})}{Z} \quad , \end{aligned}$$

mit $Z = 1 + \exp(k\frac{1}{2}) + \exp(k\frac{3}{4}) + \exp(k\frac{1}{4})$.

4. Das Teilchen bewegt sich mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeit auf einen der Plätze $i-1, i-L, i+L$, oder verbleibt auf Platz i mit der Wahrscheinlichkeit p_i (Abb. 2.3):

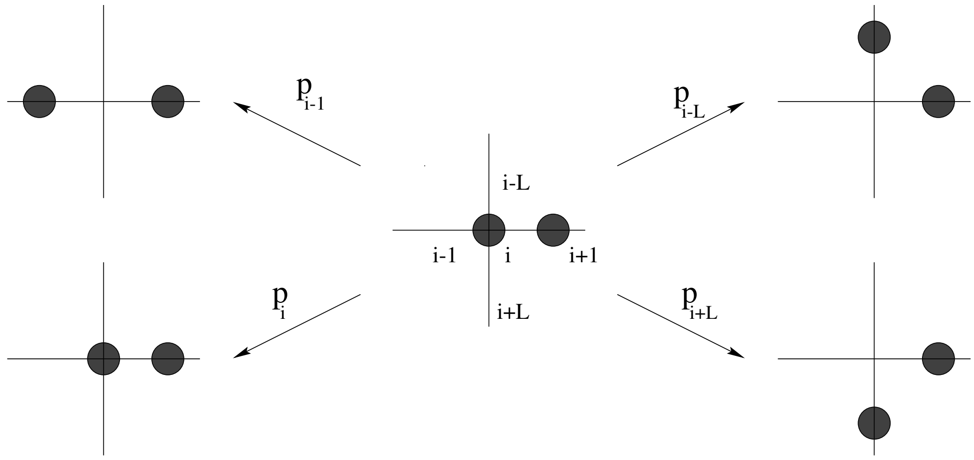


Abbildung 2.3: Teilchenbewegung

Kapitel 3

Das Modell in einer Dimension

Die Möglichkeit, das eindimensionale Modell zur realistischen Beschreibung von biologischen Aggregations- und Schwarmbildungsphänomenen zu nutzen, ist eher gering. Jedoch lassen sich auch für das eindimensionale Modell einige Realisierungsmöglichkeiten finden. Eine mögliche Anwendung ist das Verhalten bestimmter Moleküle oder Atome, die durch die Geometrie der zugrundeliegenden Umgebung auf eindimensionale Bahnen gezwungen werden, zum Beispiel in Ionenkanälen oder auf Muskelfilamenten. Eine weitere Anwendung wäre die Beschreibung von Insekten, wie zum Beispiel Termiten, in ihren Bauten.
Das Modell in einer Dimension ist jedoch vom theoretischen Gesichtspunkt von erhöhtem Interesse, da man hier am ehesten die Möglichkeit zu analytischen Beschreibungsmethoden hat. Ferner ist hier die Frage nach möglichen Analogien zu eindimensionalen Quanten-Systemen interessant. Auch zeigt das eindimensionale Modell eine weitere Besonderheit: aufgrund des fermionischen Besetzungszahl-Prinzips ist es den Teilchen nicht möglich, sich zu überholen. Sie behalten daher stets ihre ursprüngliche Reihenfolge bei. Da für den Update eines Teilchens seine nächsten und übernächsten Nachbarplätze von Bedeutung sind, umfasst die lokale Wechselwirkungsreichweite fünf Plätze (Abb. 3.1). Der lokale Konfigurationsraum des Systems ist also $2^5 = 32$ dimensional.

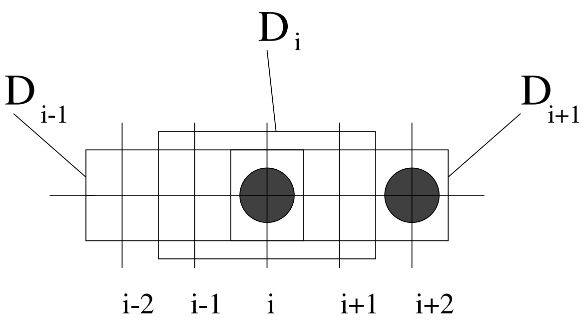
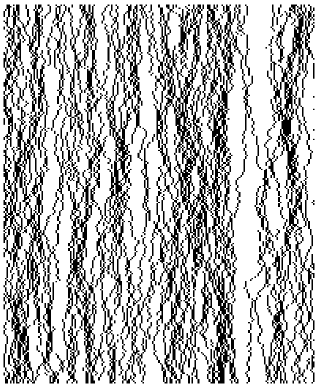


Abbildung 3.1: lokale Wechselwirkungsreichweite

3.1 Raum-Zeit-Darstellung des Modells

Um die zeitliche Entwicklung des Systems zu dokumentieren, wurden mittels Computersimulationen verschiedene Raum-Zeit-Darstellungen erstellt. Man verfolgt hierbei die Entwicklung einer beliebigen zufälligen Anfangskonfiguration über eine bestimmte Zahl von Zeitschritten. Es handelt sich stets um Gitter der Größe $L = 200$. Zunächst soll das Verhalten des Systems für eine Teilchendichte von $\rho = 0.3$ gezeigt werden. Die Simulation umfaßt 15000 Zeitschritte, wobei jedoch nur jeder sechzigste Schritt graphisch ausgegeben wird. Abb. 3.2 zeigt das System für einen Sensitivitätsparameter der Größe $k = 0.1$. Wie man sieht, bilden sich keinerlei geordnete

Zeit ↓

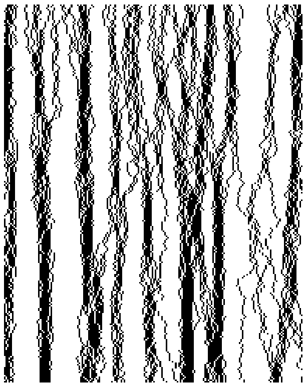


→ Raum

Abbildung 3.2: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $k = 0.1$

Strukturen aus; die Teilchen vollziehen im wesentlichen reine Zufallsbewegungen. Mit größer werdendem k ändert sich das Verhalten, wie in der nächsten Abbildung für einen Sensitivitätsparameter von $k = 4$ zu sehen ist (Abb. 3.3). Deutlich erkennt

Zeit ↓



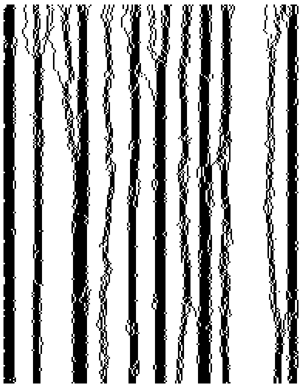
→ Raum

Abbildung 3.3: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $k = 4$

man, daß die Tendenz der Teilchen zur Aggregation zunimmt; es bilden sich Bereiche

höherer und niedrigerer Teilchendichten aus. Zwischen den Bereichen hoher Dichte ist jedoch noch ein hohes Maß an diffussiver Bewegung auszumachen.
Für einen Sensitivitätsparameter von $k = 10$ ergibt sich wiederum ein verändertes Bild (Abb. 3.4). Die Tendenz der Teilchen zur Aggregation nimmt stark zu und

Zeit ↓

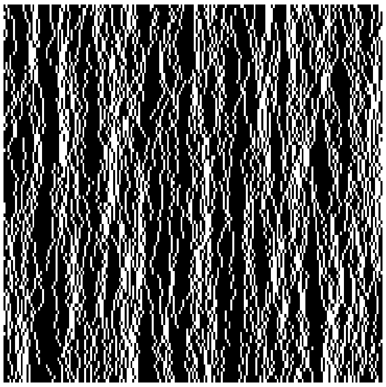


→ Raum

Abbildung 3.4: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $k = 10$

in vielen Bereichen hoher Dichte gibt es kaum noch Teilchenbewegung. Die Konfiguration verändert sich nach einer bestimmten Zahl von Updates kaum noch. Es wechseln sich Bereiche sehr hoher lokaler Dichten mit Bereichen ab, in denen kaum Teilchen liegen.
Da das eindimensionale Modell keine Teilchen-Loch-Symmetrie besitzt, macht es Sinn, sich auch eingehender mit dem Verhalten des Systems bei Dichten $\rho > \frac{1}{2}$ zu befassen. Zum Vergleich sei nun daher das Verhalten des Systems für eine Dichte von $\rho = 0.7$ bei gleichen Sensitivitätsparametern dokumentiert. Bei einer Zahl von 15000 Läufen wird nun nur noch jeder einhundertvierzigste Zeitschritt graphisch ausgegeben.
Für $k = 0.1$ erhält man wieder ein völlig ungeordnetes System (Abb. 3.5). Erneut bilden sich für $k = 4$ starke geordnete Strukturen aus, jedoch sind die Bereiche erhöhter Dichten nicht mehr so scharf voneinander getrennt. Dies hängt natürlich mit der erhöhten Dichte und der daraus resultierenden Verringerung des mittleren Teilchenabstandes zusammen (Abb. 3.6).
Für einen Sensitivitätsparameter von $k = 10$ wird der stationäre Zustand des Systems bereits nach wenigen Updates erreicht (Abb. 3.7). Die Teilchen sammeln sich in einigen wenigen Bereichen sehr hoher Dichte, die sehr scharf voneinander getrennt sind.
Wie man sieht, wird das Verhalten der Teilchen in erheblichem Maß durch den Sensitivitätsparameter bestimmt. Um quantitative Aussagen über die Stärke der Aggregation machen zu können, bietet es sich an, die *Clustergrößenverteilungen* der verschiedenen Systeme im stationären Zustand zu betrachten.

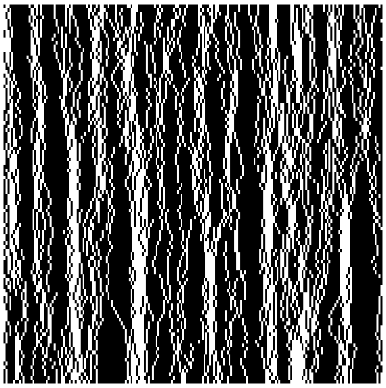
Zeit ↓



→ Raum

Abbildung 3.5: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.7$, $k = 0.1$

Zeit ↓



→ Raum

Abbildung 3.6: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.7$, $k = 4$

3.2 Clustergrößenverteilung

Unter einem Cluster der Größe n versteht man eine Anordnung von n hintereinander liegenden besetzten Gitterplätzen, an deren rechten und linken Ende jeweils mindestens ein unbesetzter Gitterplatz liegt. C_n bezeichne dann die auf eins normierte *Wahrscheinlichkeit*, einen Cluster der Größe n im stationären Zustand des Systems zu finden. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung soll nun zunächst numerisch bestimmt werden. Hierfür ist es notwendig, das System zunächst durch eine hinreichend große Zahl von Vorläufen in den stationären Zustand übergehen zu lassen, bevor man mit der Messung beginnt. Die Teilchenzahl des Systems sei N. Ferner sei die Zahl der Updates im stationären Zustand gegeben durch lN, wobei l eine beliebige hinreichend große natürliche Zahl ist. Es wird nun nach jedem N-ten Schritt die Anzahl der verschiedenen Cluster der Größen 1 bis N für die momentane Gesamtkonfiguration ermittelt. Diese Anzahl sei gegeben durch $\widetilde{C}_n$ für Cluster der Größe

Zeit $\downarrow$

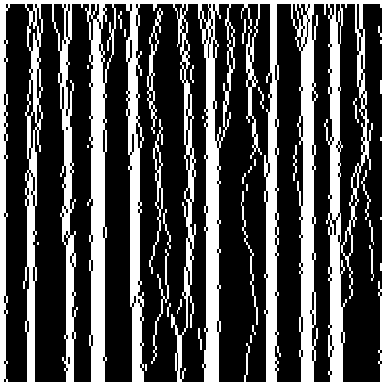


Abbildung 3.7: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.7$, $k = 10$

n, $n \in 1, \dots, N$. Dann ergibt sich für C_n:

$$C_n = \frac{\sum\limits_{l} \widetilde{C}_n}{\sum\limits_{l} \sum\limits_{j=1}^{N} \widetilde{C}_j} \quad . \tag{3.2.3.1}$$

Hieraus folgt natürlich:

$$\sum_{n=1}^{N} C_n = 1 \quad .$$

Schließlich werden die besprochenen Größen noch über eine gewisse Zahl von zufälligen Anfangskonfigurationen gemittelt. Hierdurch ist es möglich, die Statistik noch weiter zu verbessern.
Die folgenden Simulationen sind alle für ein System von 5000 Gitterplätzen und einhundert verschiedenen Anfangskonfigurationen erstellt worden. Zunächst ist in Abb. 3.8 und Abb. 3.9 das zeitliche Verhalten der Gesamtclusterzahl für die Parameter $k = 1$ und $k = 10$ und die Dichte $\rho = 0.3$ dokumentiert. Hierbei entspricht eine Zeiteinheit genau N Updates, da nach dieser Zahl jedes Teilchen des Systems im Mittel einmal ausgewählt wurde. Der Update eines einzelnen Teilchens entspricht somit dem $\frac{1}{N}$-ten Teil eines Zeitschritts. Wie man in Abb. 3.8 und Abb. 3.9 sieht, fällt die Gesamtclusterzahl von einem anfänglich hohen Wert aus der zufälligen Anfangskonfiguration recht schnell auf einen annähernd stationären Wert. Hieraus läßt sich die Tendenz der Teilchen zur Bildung von Clustern ableiten. Wobei zu bemerken ist, daß die Schwankungen des stationären Werts im Falle des kleineren Parameters $k = 1$ erheblich höher sind als im Fall $k = 10$, wo es nahezu überhaupt keine Schwankungen des stationären Werts gibt. Dies ist verständlich, da die Bewegung der Teilchen für kleine Parameter k in viel größerem Maß durch den Zufall bestimmt wird, als für großes k ($k = 0$ bedeutet eine reine Zufallsbewegung der Teilchen). Um den Verlauf der Clusterverteilungen deutlicher zu machen, sind im folgenden die

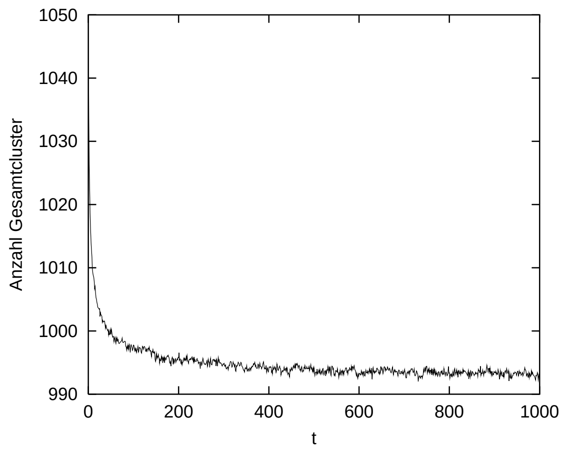


Abbildung 3.8: Zeitlicher Verlauf der Gesamtclusterzahl; $\rho = 0.3$, $L = 5000$, $k = 1$

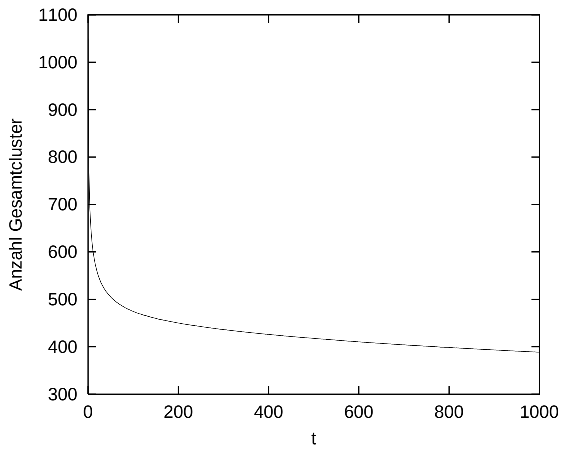


Abbildung 3.9: Zeitlicher Verlauf der Gesamtclusterzahl; $\rho = 0.3$, $L = 5000$, $k = 10$

eigentlich diskreten Meßpunkte durch Hilfslinien verbunden.
In Abb. 3.10 ist nun die Clustergrößenverteilung für eine Teilchendichte von $\rho = 0.3$ für die drei Parameter $k = 0.1, 1, 3$ zu sehen. Das Maximum der drei Verteilungen liegt jeweils bei der Clustergröße eins. Alle drei Kurven sind streng monoton fallend, wobei die Wahrscheinlichkeit, größere Cluster zu finden, mit dem Parameter k zunimmt.
In einfach-logarithmischer Darstellung ergeben sich für die Clusterverteilungen drei Geraden (Abb. 3.11). Hieraus ergibt sich, daß die Clusterverteilungen für diese Parameter exponentiell abfallen. Der exponentielle Abfall ist dadurch zu erklären, daß die Korrelationen zwischen den Clustern auf großen Skalen vernachlässigbar sind und sich die Gewichte für die Verteilung als Produktgewichte schreiben lassen. Als Referenz hierzu ist in Abb. 3.12 der Vergleich der Verteilung des Systems für $k = 0.1$ mit der Verteilung gezeigt, die sich aus einer rein zufälligen Besetzung des Gitters ergibt. Diese Verteilung erhält man mittels *Mean-Field-Theorie* (MF) aus der Dichte

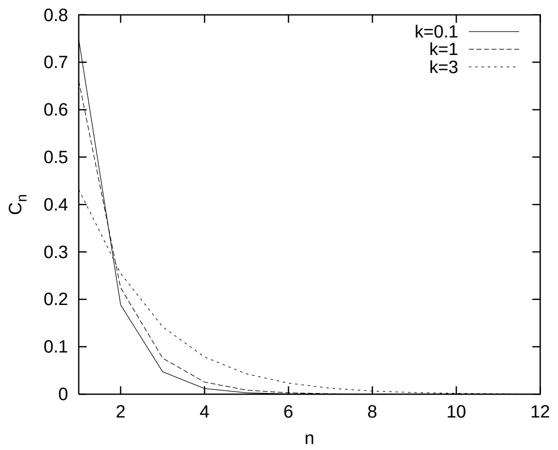


Abbildung 3.10: Clusterverteilungen; $\rho = 0.3$, $k = 0.1, 1, 3$

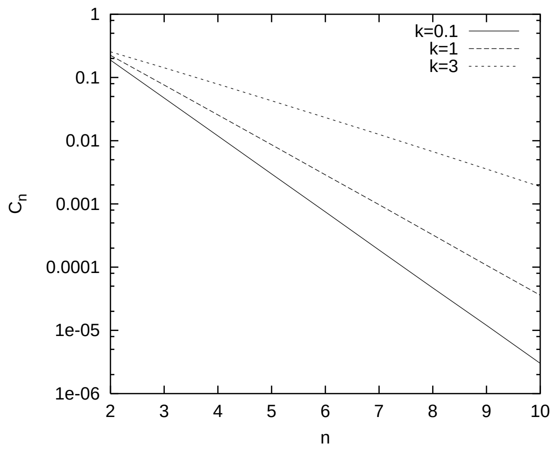


Abbildung 3.11: Clusterverteilungen in einfach-logarithmischem Auftrag; $\rho = 0.3$, $k = 0.1, 1, 3$

ρ. Es gilt hier für die Clusterwahrscheinlichkeiten im thermodynamischem Limes:

$$C_{n_{MF}} = \rho^{n-1}(1-\rho) \quad . \tag{3.2.3.2}$$

Wie man in Abb. 3.12 sieht, bestehen kaum Unterschiede zwischen den Verteilungen. Dies bestätigt das Nichtvorhandensein starker Korrelationen bei kleinen Parametern k.
Ein anderes Bild ergibt sich, wenn man den Sensitivitätsparameter k erhöht. Die nächste Graphik zeigt die Clusterverteilungen für die Parameter $k = 5, 8$ und 10 bei gleichbleibender Dichte $\rho = 0.3$ (Abb. 3.13). Zeigt die Verteilung für $k = 5$ noch ein streng monoton fallendes Verhalten, so ist dies für die beiden anderen Verteilungen nicht mehr der Fall. Beide haben ein ausgeprägtes Maximum bei einer Clustergröße von $n = 3$. Die Wahrscheinlichkeit, Cluster der Größe eins zu finden, ist annähernd auf Null gesunken.
Um das Abfallverhalten der Verteilungen für hohe Parameter eingehender zu unter-

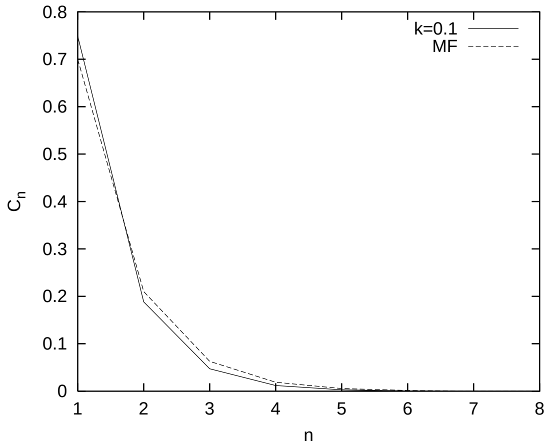


Abbildung 3.12: Clusterverteilungen für $\rho = 0.3$, $k = 0.1$ und aus MF

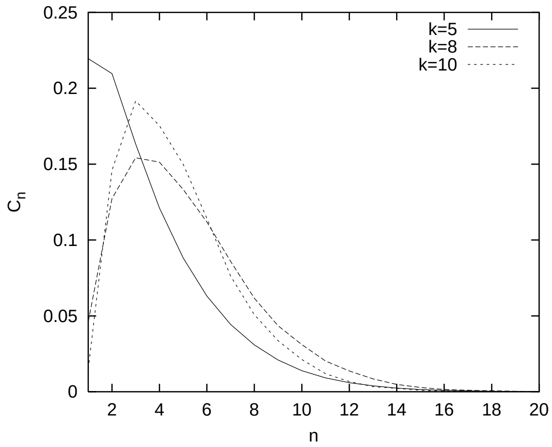


Abbildung 3.13: Clusterverteilungen; $\rho = 0.3$, $k = 5, 8, 10$

suchen, bietet es sich an, ein größeres System mit einer wesentlich erhöhten Zahl von Updates zu betrachten, um eine bessere Statistik zu erhalten. Abb. 3.14 zeigt die Verteilung für eine Systemgröße von $L = 20000$ bei einer Dichte von $\rho = 0.3$ und $k = 10$. Um eine Aussage über das Abfallverhalten der Verteilung jenseits des lokalen Maximums treffen zu können, ist in Abb. 3.15 zusätzlich eine einfach-logarithmische Darstellung eines Ausschnitts von Abb. 3.14 wiedergegeben. Hieraus läßt sich entnehmen, daß das Abfallverhalten der Wahrscheinlichkeit große Cluster zu finden für hohe Parameterwerte k exponentiell ist.
Im nächsten Schritt soll nun das Verhalten des Systems für unterschiedliche Dichten bei gleichbleibendem Parameter k untersucht werden. Es handelt sich hierbei wieder um Systeme der Gittergröße $L = 5000$. Zunächst sind die Verteilungen für die Dichten $\rho = 0.3, 0.5, 0.7$ bei einem Parameter von $k = 1$ dargestellt (Abb. 3.16). Während die Verteilungen für $\rho = 0.3$ und $\rho = 0.5$ sehr ähnlich verlaufen, ist die Verteilung für $\rho = 0.7$ weitaus homogener. Auch liegt der Anteil an Clustern der Größe eins deutlich unter fünfzig Prozent. Dies ist eine Folge des verringerten mitt-

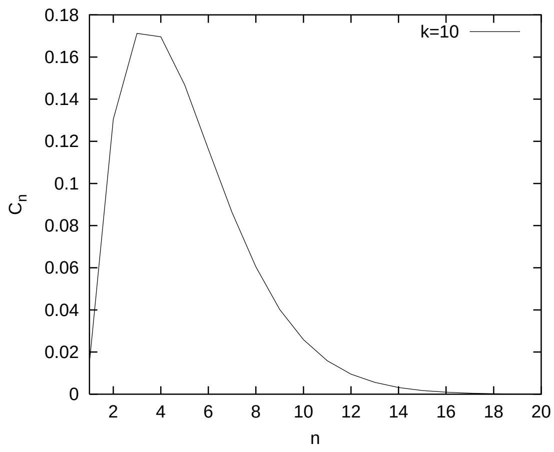


Abbildung 3.14: Clusterverteilung; $\rho = 0.3$, $k = 10$, $L = 20000$

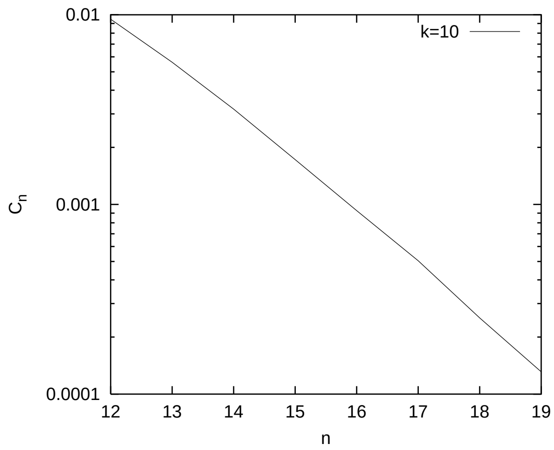


Abbildung 3.15: Clusterverteilung im einfach-log. Auftrag; $\rho = 0.3$, $k = 10$, $L = 20000$

leren Teilchenabstandes. Jedoch zeigen alle drei Verteilungen einen exponentiellen Abfall, wie man nach einfach logarithmischem Auftrag erkennen kann (Abb. 3.17). Als zweites werden die Verteilungen für dieselben Dichten bei einem Sensitivitätsparameter von $k = 10$ miteinander verglichen (Abb. 3.18). Auch hier ergibt sich wieder ein ähnliches Bild. Die Verteilung für die Dichte $\rho = 0.7$ ist viel homogener als die anderen beiden. Auch zeigt sie kein Maximum mehr und hat endliche Clusterwahrscheinlichkeiten für wesentlich größere Cluster.

Nachdem nun einige Eigenschaften des Systems anhand numerischer Methoden untersucht worden sind, ist man auch daran interessiert, mit Hilfe analytischer Methoden brauchbare Aussagen über das System machen zu können. Eine hierzu geeignete Methode ist die *cell-oriented mean-field theory* (COMF). Auf diese soll im nächsten Abschnitt näher eingegangen werden.

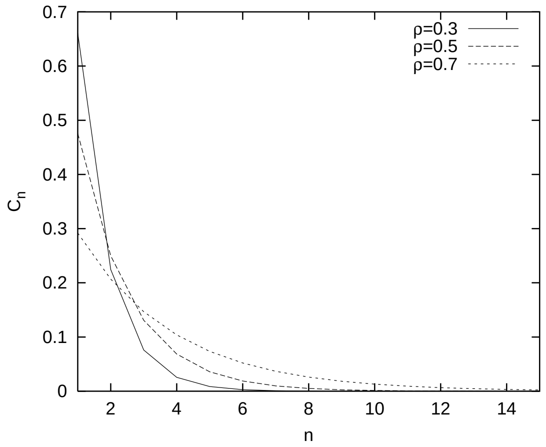


Abbildung 3.16: Clusterverteilungen; $\rho = 0.3$, 0.5, 0.7, $k = 1$

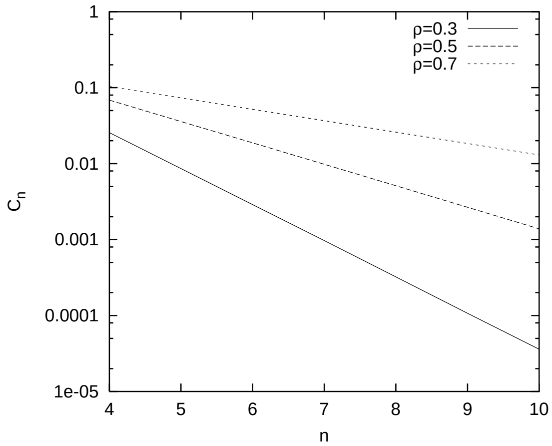


Abbildung 3.17: Clusterverteilungen, einfach-log. Auftrag; $\rho = 0.3$, 0.5, 0.7, $k = 1$

3.3 COMF

Die „cell-oriented mean-field (COMF)"Theorie[1] ist eine Möglichkeit, Korrelationen zwischen den Gitterplätzen in einer analytischen Beschreibung zu berücksichtigen [23]. Der Begriff „*cell*"bezieht sich hierbei nicht auf die Gitterzellen des Zellularautomaten, sondern meint ein einzelnes Teilchen. In diesem Sinne wäre es besser von *particle-oriented mean-field theory* zu sprechen. Die zentrale Größe in COMF ist die Wahrscheinlichkeit $P_t(n)$ zum Zeitpunkt t, n unbesetzte Plätze vor einem Teilchen zu finden. Im stationären Zustand des Systems ist dies unabhängig von dem Platz, auf dem sich das Teilchen befindet. Darüber hinaus geht die Wahrscheinlichkeit $P_t(n)$ im stationären Zustand über in $P(n)$. Auf diese Weise werden spezielle langreichweitige Korrelationen berücksichtigt. Allerdings werden bei diesem Verfahren Korrelationen zwischen den Clustern vernachlässigt.

[1] In [23, 24] wird COMF eingeführt als „car-oriented mean-field"Theorie.

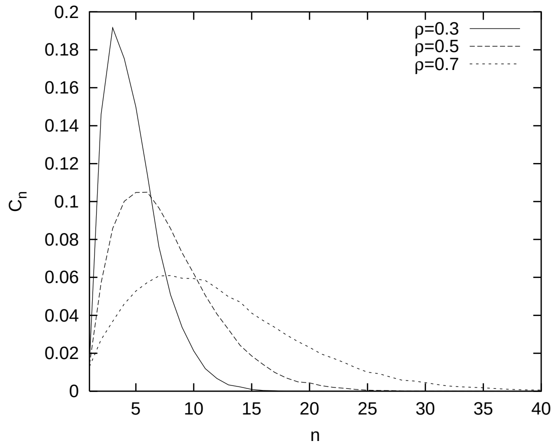


Abbildung 3.18: Clusterverteilungen; $\rho = 0.3,\ 0.5,\ 0.7,\ k = 10$

Stets gilt die Normierungsbedingung:

$$\forall_t : \quad \sum_{j=0}^{\infty} P_t(j) = 1 \quad . \tag{3.3.3.1}$$

Man beachte, daß der hier gemachte COMF-Ansatz den thermodynamischen Limes voraussetzt [23, 24]. Aus (3.3.3.1) folgt dann:

$$\sum_{j>1}^{\infty} P_t(j) = 1 - P_t(0) - P_t(1) \quad . \tag{3.3.3.2}$$

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten $P_{t+\frac{1}{N}}(j)$ aus den Wahrscheinlichkeiten $P_t(j)$ ist in Anhang A aufgeführt.
Im stationären Zustand werden die Wahrscheinlichkeiten $P_t(j)$ zeitunabhängig und es gilt:

$$\forall_j \quad \lim_{t\to\infty} \{P_{t+\frac{1}{N}}(j) - P_t(j)\} \approx \frac{1}{N}\frac{\partial P_t(j)}{\partial t} = 0 \quad . \tag{3.3.3.3}$$

Hieraus folgen mit $(A.7.2)$ und dem Übergang $P_t(j) \to P_j$ die COMF-Gleichungen für den stationären Zustand:

$$P_0 = c_1 P_0 + c_2 P_1 \quad , \tag{3.3.3.4}$$
$$P_1 = c_4 P_0 + c_3 P_1 + c_5 P_2 \quad , \tag{3.3.3.5}$$
$$P_2 = c_7 P_1 + c_6 P_2 + c_5 P_3 \quad , \tag{3.3.3.6}$$
$$P_j = c_8 P_{j-1} + c_6 P_j + c_5 P_{j+1} \quad , \qquad \forall_{j>2} \quad . \tag{3.3.3.7}$$

Es läßt sich zeigen, daß zwischen den Faktoren c_i folgende Beziehungen gelten:

$$c_1 + c_4 = 1 \quad , \tag{3.3.3.8}$$
$$c_2 + c_3 + c_7 = 1 \quad , \tag{3.3.3.9}$$
$$c_5 + c_6 + c_8 = 1 \quad . \tag{3.3.3.10}$$

Die Gewichte P_j müssen folgende Normierungsbedingungen erfüllen:

$$1 = \sum_{j=0}^{\infty} P_j \quad , \tag{3.3.3.11}$$

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) P_j \quad . \tag{3.3.3.12}$$

(3.3.3.12) ist eine Konsequenz aus der Teilchenzahlerhaltung, da jedes Teilchen mit j freien Plätzen rechts neben sich $j+1$ Plätze belegt. Aus (3.3.3.8) lassen sich folgende Rekursionsbeziehungen zwischen den Gewichten P_j herleiten:

$$\begin{aligned} c_4 P_0 &= c_2 P_1 \quad , \\ c_7 P_1 &= c_5 P_2 \quad , \\ c_8 P_j &= c_5 P_{j+1} \quad , \qquad \forall_{j>2} \quad . \end{aligned} \tag{3.3.3.13}$$

Setzt man nun (3.3.3.13) in (3.3.3.12) ein, so erhält man:

$$\frac{1}{\rho} = 1 + \frac{c_4}{c_2} P_0 \left\{ 1 + \frac{c_7}{c_5} \sum_{j=0}^{\infty} (j+2) (\frac{c_8}{c_5})^j \right\} \quad . \tag{3.3.3.14}$$

Es läßt sich zeigen, daß für alle endlichen Sensitivitätsparameter k gilt: $\frac{c_8}{c_5} < 1$ und $\lim_{k\to\infty} \frac{c_8}{c_5} = 1$. Damit folgt aus (3.3.3.14) unter Verwendung einfacher Sätze über die geometrische Reihe

$$\frac{1}{\rho} = 1 + \frac{c_4}{c_2} P_0 \left\{ 1 + \frac{c_7}{c_5} (\frac{1}{(1-\frac{c_8}{c_5})^2} + \frac{1}{(1-\frac{c_8}{c_5})}) \right\} \quad , \tag{3.3.3.15}$$

als Formel für die reziproke Dichten. Aus der ersten Rekursionsgleichung in (3.3.3.13) läßt sich eine Beziehung zwischen P_0 und P_1 gewinnen:

$$\begin{aligned} P_1 = & \frac{-(p_3(1-P_0) + p_8 P_0)}{2(p_4 - p_3)} \\ & - \sqrt{(\frac{(p_3(1-P_0) + p_8 P_0)}{2(p_4 - p_3)})^2 + \frac{p_8(1-P_0)P_0}{(p_4 - p_3)}} \quad . \end{aligned} \tag{3.3.3.16}$$

Setzt man nun (3.3.3.16) in (3.3.3.15) ein, so hat man bei vorgegebener Dichte ρ eine implizite Bestimmungsgleichung für P_0, die sich mittels einfacher numerischer Methoden lösen läßt.
Wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, beschreibt C_n die Wahrscheinlichkeit, einen Cluster der Größe n im stationären Zustand zu finden. In der COMF-Theorie ist C_n proportional zu $(1-P_0)P_0 \ldots P_0(1-P_0) = (1-P_0)^2 P_0^{n-1}$ [23, 24]. Hierbei entspricht ${P_0}^{n-1}$ der Wahrscheinlichkeit, n hintereinander liegende Teilchen zu finden. $(1-P_0)^2$ ist dann die Wahrscheinlichkeit, daß diese n Teilchen von zwei unbesetzten Plätzen flankiert werden. Die Anzahl der Gesamtcluster ist proportional zu $1-P_0$, so daß sich hieraus

$$C_n = (1-P_0) P_0^{n-1} \tag{3.3.3.17}$$

ergibt. Die Verteilung, die sich hieraus ergibt, ist rein exponentiell, und es gilt $P_n > P_{n+1}$ für alle n. COMF ist also nicht in der Lage, langreichweitige Korrelationen, die etwa zu Phasenseparation führen können, zu beschreiben.
Als nächstes sollen die mittels COMF errechneten Clusterverteilungen mit denen aus den Simulationen gewonnenen verglichen werden. Zunächst sind die Ergebnisse für die schwachen Parameter $k = 0.1$ und $k = 1$ bei einer Dichte von $\rho = 0.3$ aufgetragen (Abb. 3.19). Wie man in Abb. 3.19 sieht, ist die Übereinstimmung zwischen

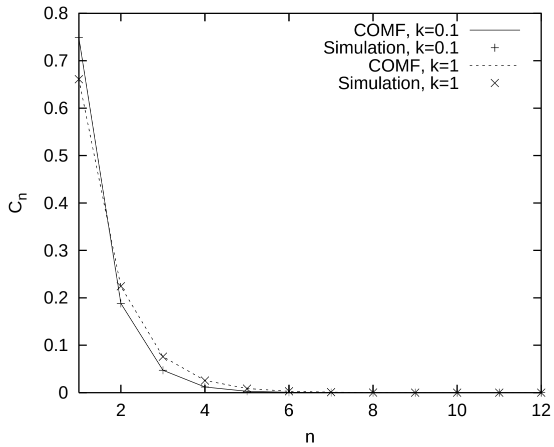


Abbildung 3.19: Clusterverteilungen, Vergleich von COMF und Simulation; $\rho = 0.3$, $k = 0.1, 1$

Theorie und Simulation für kleine k ausgezeichnet, die Werte aus der Simulation liegen exakt auf der theoretischen Kurve.
Als nächstes sind bei gleichbleibender Dichte die Kurven für die Parameter $k = 3$ und $k = 5$ dargestellt (Abb. 3.20). Während COMF und Simulation für $k = 3$ noch

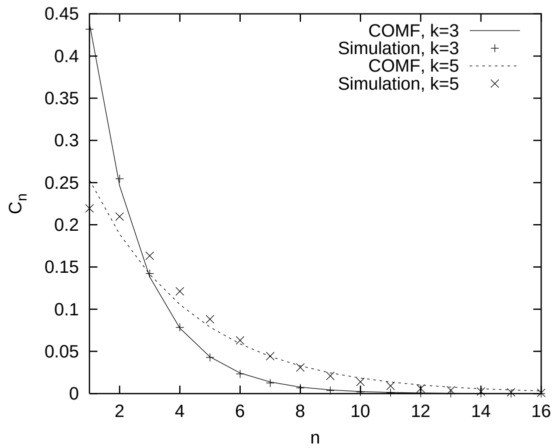


Abbildung 3.20: Clusterverteilungen, Vergleich von COMF und Simulation; $\rho = 0.3$, $k = 3, 5$

annähernd exakt übereinstimmen, zeigen sich im Fall $k = 5$ für kleinere Clustergrößen kleine Abweichungen. Insgesamt ist die Übereinstimmung jedoch sehr gut. Dies ändert sich, wenn man noch höhere Parameter k betrachtet. Abb. 3.21 zeigt den Vergleich zwischen COMF und der Simulation für die Parameter $k = 8$ und $k = 10$. Wie man sieht ist, COMF für große Parameter $k > 5$ nicht in der Lage, die

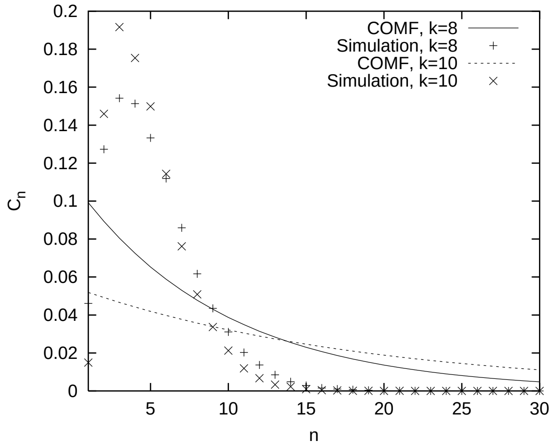


Abbildung 3.21: Clusterverteilungen, Vergleich von COMF und Simulation; $\rho = 0.3$, $k = 8, 10$

Wahrscheinlichkeitsverteilung realistisch zu beschreiben. Hier existieren offensichtlich zu starke Korrelationen zwischen den Clustern, die durch COMF nicht erfaßt werden.
Um zu überprüfen, welchen Stellenwert beim Vergleich von COMF mit den Simulationen die Dichte besitzt, sollen nun noch die Dichten $\rho = 0.5$ und $\rho = 0.7$ für zwei Parameterwerte von k verglichen werden. Abb. 3.22 zeigt den Vergleich für $k = 1$. Zusätzlich wurde auch das Verhalten bei der Dichte $\rho = 0.3$ noch einmal mitabgebildet. Die Verteilung wird für sämtliche Dichten gleichermaßen gut durch COMF

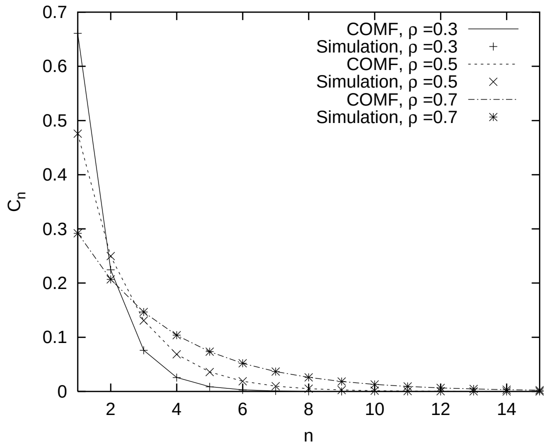


Abbildung 3.22: Clusterverteilungen, Vergleich von COMF und Simulation; $\rho = 0.3, 0.5, 0.7$, $k = 1$

beschrieben. Unabhänig von der Dichte liegen im System bei kleinen Parameterwerten k keine langreichweitigen Korrelationen vor.
Dies ändert sich stark für große k. Auch hier spielt die Dichte lediglich eine untergeordnete Rolle. Abb. 3.23 zeigt den Vergleich der selben Dichten wie in Abb. 3.22, jedoch für einen Parameter $k = 10$. Aus Abb. 3.23 ist ersichtlich, daß COMF in

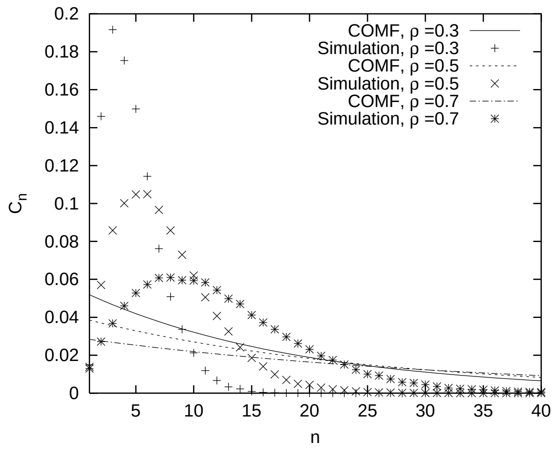


Abbildung 3.23: Clusterverteilungen, Vergleich von COMF und Simulation; $\rho = 0.3, 0.5, 0.7$, $k = 10$

keinem Fall in der Lage ist, das tatsächliche Verhalten des Systems zufriedenstellend zu beschreiben. Es existieren also für große Sensitivitätsparameter k zu starke Korrelationen zwischen den Teilchen.
Im nächsten Kapitel soll das Verhalten des Systems für $k \to \infty$ eingehend untersucht werden.

3.4 Der deterministische Grenzfall

Der Übergang $k \to \infty$ hat erheblichen Einfluß auf die Hüpfraten p_i der Teilchen im letzten Schritt des Updates (siehe Definition des Modells). Es existieren dann lediglich noch die drei Hüpfraten $p_i = 0, \frac{1}{2}, 1$, wie im nächsten Abschnitt erläutert ist. Dieser Übergang hat zur Folge, daß zwar weiterhin die Anfangskonfiguration und die Reihenfolge beim Update der Teilchen zufällig bleibt, sich jedoch der eigentliche Update der Teilchen in (annähernd) deterministischer Weise vollzieht. Hierdurch verliert das Modell einen großen Teil seiner stochastischen Natur. Bevor man sich nun eingehender mit diesem Grenzfall beschäftigt, scheint es daher notwendig, die resultierenden Konsequenzen genau anzugeben. Dies führt zur Definition eines neuen quasi-deterministischen Modells.

3.4.1 Das quasi-deterministische Modell

Weiterhin wird ein zufällig-sequentieller Update benutzt. Es können nur Teilchen bewegt werden, die mindestens einen unbesetzten nächsten Nachbarplatz besitzen. Es gelten folgende Regeln:

- Teilchen, die durch eine Bewegung nach links oder rechts ihre lokale Dichte erhöhen können, vollziehen diese Bewegung mit der Wahrscheinlichkeit $p_{\text{gesamt}} = 1$ (Abb. 3.24).

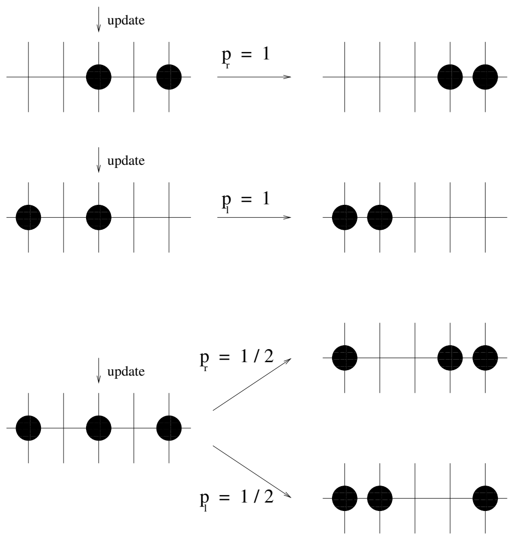


Abbildung 3.24: Erhöhung der lokalen Dichte

- Kein Teilchen vollzieht eine Bewegung auf einen Platz geringerer lokaler Dichte (Abb. 3.25).

- Gilt für ein Teilchen auf Platz i $D_i = \frac{1}{2}$ und zusätzlich $D_{i+1} = \frac{1}{2}$ oder $D_{i-1} = \frac{1}{2}$, so verbleibt es mit der Wahrscheinlichkeit $p = \frac{1}{2}$ auf seinem Platz, oder wechselt mit der Wahrscheinlichkeit $p = \frac{1}{2}$ auf den Nachbarplatz gleicher lokaler Dichte (Abb. 3.26).

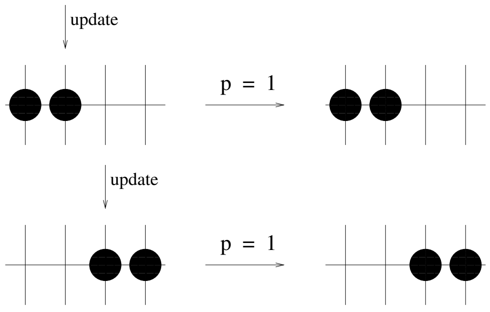


Abbildung 3.25: Erhalt der lokalen Dichte

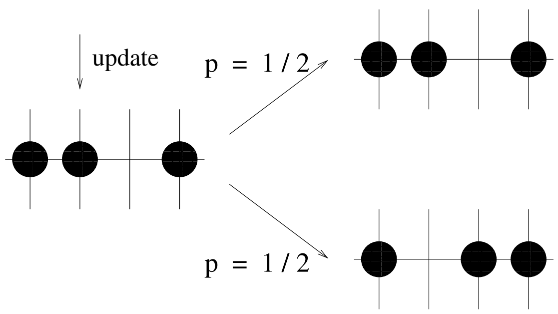


Abbildung 3.26: gleiche lokale Dichte

- Gilt sowohl $D_i = 0$ als auch $D_{i-1} = D_{i+1} = 0$, so wechselt das Teilchen mit Wahrscheinlichkeit $p = \frac{1}{2}$ auf Platz $i-1$ und mit Wahrscheinlichkeit $p = \frac{1}{2}$ auf Platz $i+1$. Diese Regel dient dazu, den Ablauf des Prozeßes zu beschleunigen. Man könnte dem Teilchen auch die Möglichkeit einräumen, auf dem Platz i zu verweilen, ohne das Modell wesentlich zu verändern.

3.4.2 Clusterverteilungen

Wie man sich leicht überlegen kann, kommt es bei diesem Modell nach einer endlichen Zahl von Updates zu Konfigurationen, in denen jedes Teilchen bei einer Bewegung nach links oder rechts seine lokale Dichte nur noch verringern könnte. Da dies nach obiger Definition jedoch ausgeschlossen ist, kommt es zu keiner weiteren Bewegung der Teilchen mehr. Das System entwickelt sich somit stets in einen inaktiven Zustand, der als *eingefrorene Endkonfiguration* bezeichnet werden soll. In Abb. 3.27 ist zur Veranschaulichung der Übergang eines Systems von einer Konfiguration mit zwei aktiven Teilchen in die eingefrorene Endkonfiguration dargestellt. Zur Vereinfachung sei ein System der Gitterlänge $L = 12$ und der Teilchenzahl $N = 6$ gewählt. Als direkte Konsequenz aus diesen Überlegungen ergibt sich zum Beispiel die Tatsache, daß es in den inaktiven Endkonfigurationen keine Cluster der Größe eins mehr geben kann.
Infolge der oben aufgeführten Überlegungen ändert sich nun der Meßvorgang der Clusterverteilungen in den Simulationen. Der zufällig sequentielle Update vollzieht sich nur noch unter den aktiven Teilchen, das heißt den Teilchen, die durch eine

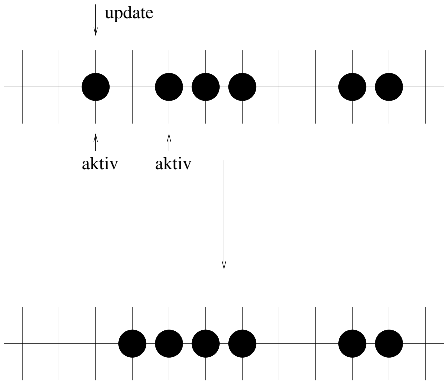


Abbildung 3.27: inaktive Endkonfiguration

Bewegung ihre lokale Dichte mindestens erhalten. Der eigentliche Meßvorgang der Clusterverteilung wird dann nur noch einmal nach Erreichen der inaktiven Endkonfiguration ausgeführt. Hierdurch ist man in der Lage, für sehr große Systeme, schnell Ergebnisse zu produzieren. Die erhaltenen Clusterverteilungen werden wie bisher über eine genügend große Zahl von zufälligen Anfangskonfigurationen gemittelt.
Zunächst sind in Abb. 3.28 die Verteilungen für ein System der Gittergröße $L = 20000$ bei den Dichten $\rho = 0.3, 0.5$ und 0.7 dargestellt. Es zeigt sich ein ähnliches

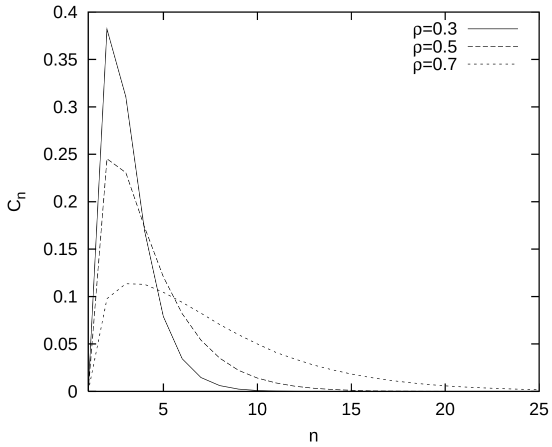


Abbildung 3.28: Verteilung im deterministischen Grenzfall; $\rho = 0.3, 0.5, 0.7$

Bild wie im Fall des ursprünglichen Systems für große Sensitivitätsparameter k. Neben einem ausgeprägten Maximum fallen alle drei Verteilungen relativ schnell stark ab. Daß es nicht zur Ausbildung größerer Cluster kommt, wird verständlich, wenn man den Determinismus des Modells in Betracht zieht. Cluster, die durch eine Lücke von mehr als einem unbesetzten Platz getrennt sind, können nicht zu einem größeren Cluster verschmelzen (siehe Abb. 3.27). Der Abfall der Verteilungen jenseits ihres Maximums ist exponentiell. Dies ist durch eine einfach-logarithmische Auftragung der Verteilung für die Dichte $\rho = 0.5$ in Abb. 3.29 zu sehen.
Zuletzt sollen nun noch die Verteilungen im deterministischen Grenzfall mit denen

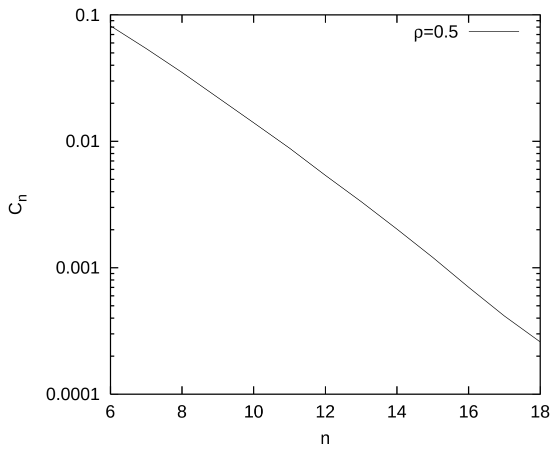


Abbildung 3.29: einfach-logarithmische Darstellung; $\rho = 0.5$

des ursprünglichen Modells für hohe Parameter k verglichen werden. Abb. 3.30 und Abb. 3.31 zeigen den Vergleich für einen Parameterwert $k = 10$ bei den Dichten $\rho = 0.3$ und 0.7. Wie bereits erläutert kommt es im deterministischen Fall nicht

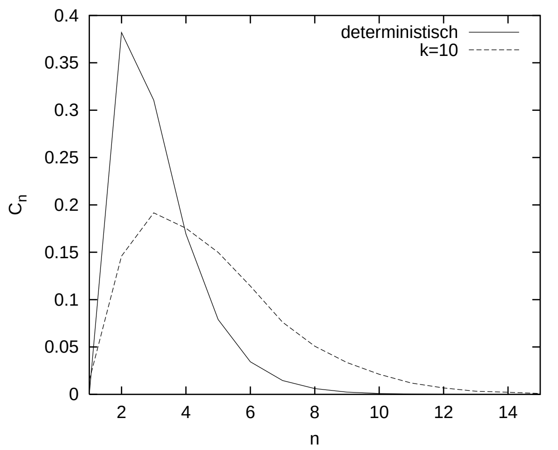


Abbildung 3.30: Verteilungen im deterministischen Fall und $k = 10$; $\rho = 0.3$

zur Ausbildung von Clustern der Größe eins. In beiden Fällen besitzt das System im deterministischen Fall ein ausgeprägteres Maximum als im herkömmlichen Fall. Auch ist der Abfall der Verteilung jenseits des Maximums wesentlich schärfer. Im Fall $k = 10$ bilden sich jedoch mit um einiges größerer Wahrscheinlichkeit stabile große Cluster aus. Die Erklärung hierfür wurde bereits weiter oben gegeben. Indem man im deterministischen Fall keine Stochastik beim eigentlichen Update mehr zuläßt, verhindert man das Zusammenfließen einzelner kleinerer Cluster zu einem größeren.
Im nächsten Abschnitt soll nun versucht werden die Verteilung des deterministischen Modells mittels einfacher kombinatorischer Methoden zu beschreiben.

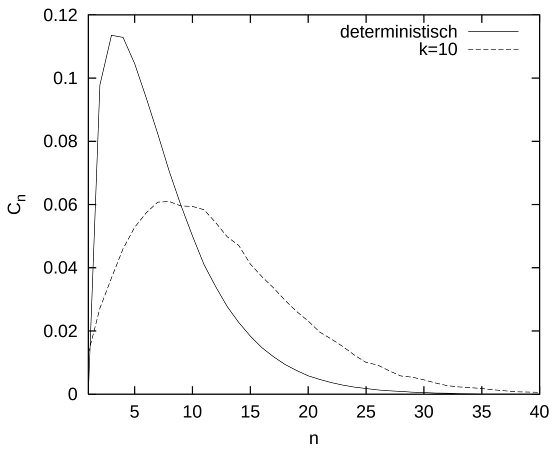


Abbildung 3.31: Verteilungen im deterministischen Fall und $k = 10$; $\rho = 0.7$

3.4.3 Versuch einer kombinatorischen Beschreibung

Wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, haben die eingefrorenen Endkonfigurationen des Systems im deterministischen Grenzfall spezielle Eigenschaften:

- es existieren keine Cluster der Größe eins,
- sämtliche Cluster sind durch mindestens zwei unbesetzte Plätze voneinander getrennt.

Die Anzahl der Möglichkeiten, N Teilchen auf einem Gitter der Größe L zu verteilen, ist gegeben durch:

$$\binom{L}{N} \quad .$$

Von diesen Möglichkeiten werden nun diejenigen, die obige Eigenschaften nicht erfüllen, das heißt als eingefrorene Endkonfigurationen nicht in Frage kommen, eliminiert. Anschließend wird über die Clusterverteilungen der verbleibenden Konfigurationen gemittelt. Dies geschieht numerisch und ist mit vertretbarem Rechenaufwand nur für Systeme mit einer Gitterlänge bis zu $L = 32$ möglich. Die so gewonnene Verteilung sei als *inaktive Binominalverteilung* bezeichnet.
Abb. 3.32 zeigt den Vergleich zwischen der Verteilung, die aus den beiden Exklusionsregeln nach obigen Überlegungen gewonnen wurde, mit der Verteilung aus einer Simulation für das deterministische Modell. Die Systemgröße beträgt $L = 32$ und die Dichte $\rho = 0.25$. Beide Verteilungen haben ihr Maximum bei einer Clustergröße von zwei, jedoch liegt der zugehörige Maximalwert aus der Simulation weit unter dem der inaktiven Binominalverteilung. Für Cluster ab der Größe vier wird die Übereinstimmung jedoch recht brauchbar. Somit ist zu vermuten, daß für größere Systeme die inaktive Binominalverteilung in der Lage ist, das Abfallverhalten der Verteilungen für große Cluster zufriedenstellend zu beschreiben.
Abschließend ist der Vergleich zwischen den beiden Verteilungen für eine Dichte von

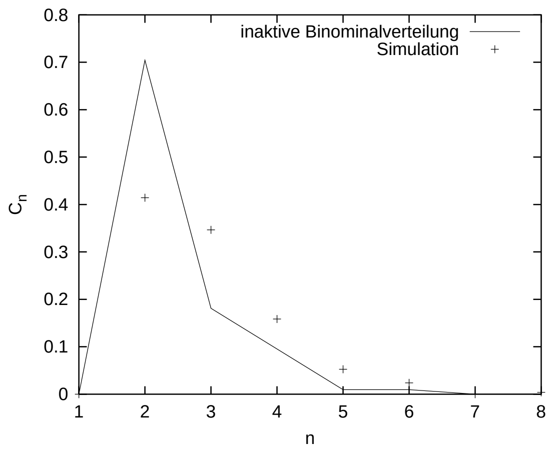


Abbildung 3.32: Vergleich der Verteilungen; $\rho = 0.25$

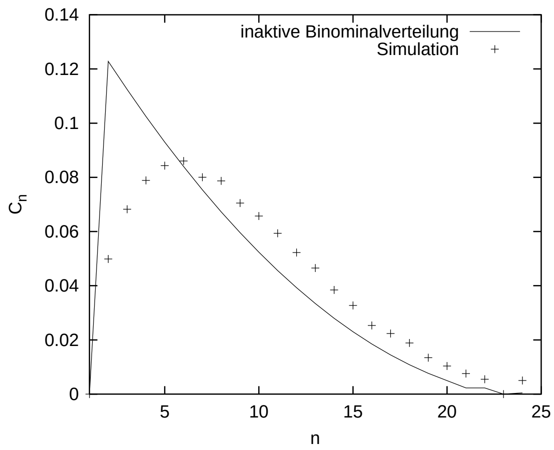


Abbildung 3.33: Vergleich der Verteilungen; $\rho = 0.75$

$\rho = 0.75$ in Abb. 3.33 dargestellt. Wie Abb. 3.33 zeigt, werden die oben gefundenen Ergebnisse bestätigt. Die inaktive Binominalverteilung ist nicht in der Lage das Verhalten der Verteilung des Models für kleine Clustergrößen befriedigend wiederzugeben. Auch liegen die Maxima der Verteilung bei unterschiedlichen Clustergrößen. Jedoch wird das Abfallverhalten der Verteilung des Modells für große Cluster durch die inaktive Binominalverteilung durchaus zufriedenstellend beschrieben.
Im nächsten Kapitel soll eine weitere Modifizierung des ursprünglichen eindimensionalen Modells betrachtet werden.

3.5 Wechselwirkungsreichweite $s > 1$

Nach Definition des Modells sind die Teilchen lediglich in der Lage die lokalen Dichten in einem Gitterbereich zu messen, der nur nächste Nachbarplätze umfaßt. Daher bewegen sich die Teilchen unter Umständen in Gebiete, in denen über einen größeren Gitterbereich gemessen, eine niedrigere lokale Teilchendichte vorherrscht. Dieser Sachverhalt läßt sich zum Beispiel anhand von (Abb. 3.34) verdeutlichen. Daher

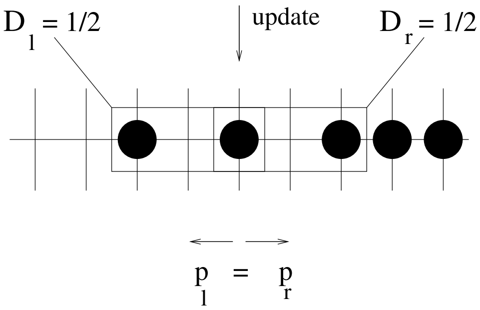


Abbildung 3.34: gleiche lokale Dichten

erscheint es sinnvoll, die Messung der lokalen Dichten auf einen größeren Bereich als die nächsten Nachbarplätze auszudehnen, um die Bildung größerer Cluster zu unterstützen. Dies alles soll aber unter Wahrung des Prinzips der lokalen Wechselwirkung geschehen. Es sollten also die Messungen der lokalen Dichten auf einige wenige Nachbarplätze beschränkt werden. Um dies quantitativ erfassen zu können, wird daher ein neuer diskreter Parameter $s \in \{1, \ldots, \infty\}$ in das Modell eingeführt. Dieser Parameter s beschreibt die Wechselwirkungsreichweite bei der Messung der lokalen Dichten. Ein Wert von $s = 1$ entspricht dem herkömmlichen Modell. Die Messung der lokalen Dichten ist auf die beiden nächsten Nachbarplätze beschränkt (siehe (Abb. 3.35)). Da sich ein Teilchen nur bewegen kann, wenn es mindestens

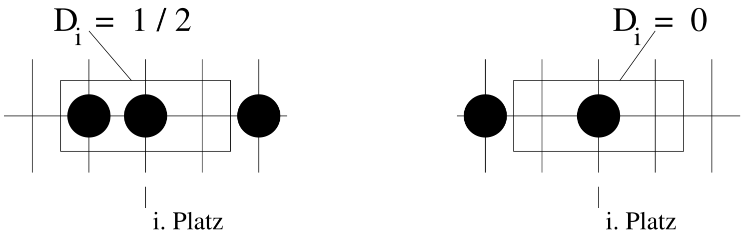


Abbildung 3.35: Wechselwirkungsreichweite $s = 1$

einen unbesetzten nächsten Nachbarplatz hat, und auch nur in diesem Fall lokale Dichten gemessen werden, ergeben sich als mögliche Werte $D = 0$ oder $D = \frac{1}{2}$ (Abb. 3.35). Bei einem Parameter von $s = 2$ bezieht das Teilchen bei der Messung auch seine beiden übernächsten Nachbarplätze mit ein. Es ergeben sich somit als mögliche lokale Dichten $D \in \{0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\}$, wie man sich anhand von Abb. 3.36 klarmacht. Allgemein bedeutet also Wechselwirkungsreichweite s, daß bei der Messung der lo-

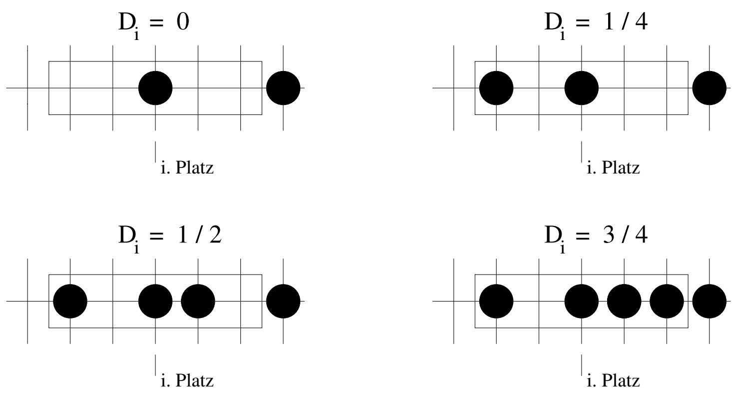


Abbildung 3.36: Wechselwirkungsreichweite $s = 2$

kalen Dichten die s nächsten Nachbarn des betreffenden Teilchens berücksichtigt werden. Hieraus ergibt sich als Wertemenge der lokalen Dichten für ein beliebiges $s \in \{1, \dots, \infty\}$:

$$D \in \{0, \frac{1}{2s}, \dots, \frac{2s-1}{2s}\} \quad . \qquad (3.5.3.1)$$

Entsprechend der Zahl der möglichen lokalen Dichten steigt natürlich ebenso die Zahl der möglichen Gewichte, die für die Bewegung der Teilchen verantwortlich sind.
In Abb. 3.37 ist für ein System der Größe $L = 5000$ und eine Dichte $\rho = 0.3$ der Vergleich der Wechselwirkungsreichweiten $s = 1, 2, 3$ und 4 für den niedrigen Sensitivitätsparameter $k = 1$ dargestellt. Wie man in Abb. 3.38 sieht, wirkt sich die

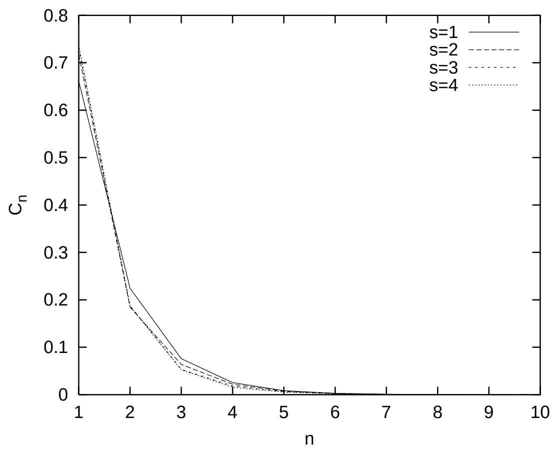


Abbildung 3.37: Vergleich der Verteilungen für verschiedene s; $\rho = 0.3$ und $k = 1$

Erhöhung der Wechselwirkungsreichweite s für niedrige Parameter k nur gering auf die Clusterverteilung aus. Alle vier Verteilungen zeigen annähernd den selben Verlauf.
Der Vergleich für den mittleren Parameter $k = 5$ in Abb. 3.38 läßt hingegen größere

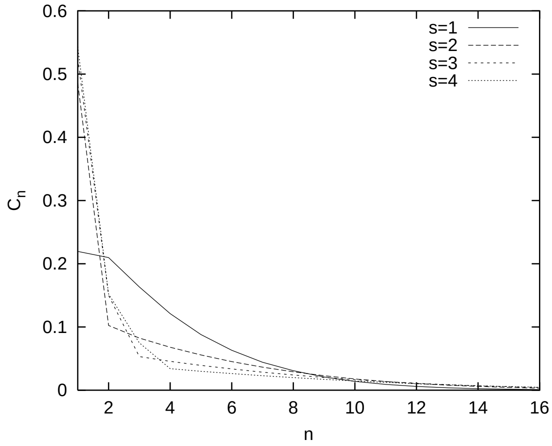


Abbildung 3.38: Vergleich der Verteilungen für verschiedene s; $\rho = 0.3$ und $k = 5$

Unterschiede erkennen. Im Gegensatz zu der Verteilung für $s = 1$ haben alle anderen Verteilungen ein ausgeprägtes Maximum bei der Clustergröße eins, die Wahrscheinlichkeit Cluster der Größe $n > 5$ zu finden, ist jedoch für alle Verteilungen annähernd gleich groß.
Erst für große Sensitivitätsparameter k zeigen sich jedoch deutliche Unterschiede. Der Vergleich zwischen den Verteilungen ist für $k = 10$ in Abb. 3.39 abgebildet. Die Verteilung für $s = 1$ besitzt lediglich ein lokales Maximum bei der Clustergröße

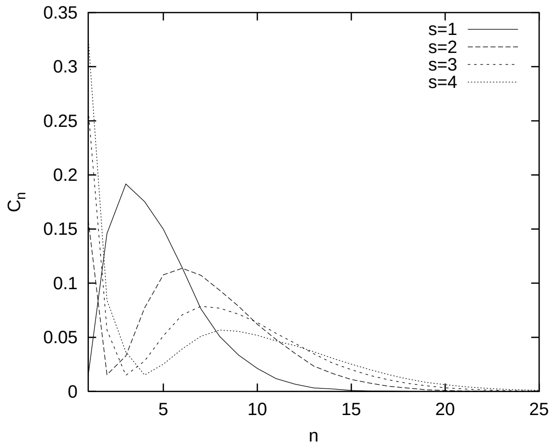


Abbildung 3.39: Vergleich der Verteilungen für verschiedene s; $\rho = 0.3$ und $k = 10$

$n = 3$. Alle anderen Verteilungen haben ein globales Maximum bei der Clustergröße eins und lokale Maxima bei Werten von $n > 5$. Auch werden die Verteilungen mit zunehmendem s um das lokale Maximum immer breiter und flacher. Ferner nimmt die Wahrscheinlichkeit, größere Cluster zu erhalten, mit steigendem s deutlich zu.
Durch die Einführung der Wechselwirkungsreichweite s ist man also in der Lage, bei hinreichend großem Parameter k, die Wahrscheinlichkeit für die Existenz größerer Cluster zu steigern; jedoch muß man hierbei inkaufnehmen, daß auch die Wahr-

scheinlichkeit für die Existenz von Clustern der Größe eins wieder stark zunimmt, die ja für $s = 1$ bei großem k annähernd auf Null absinkt. Es läßt sich also der ursprünglich gewünschte Effekt, die Existenzwahrscheinlichkeit für große Cluster deutlich zu erhöhen, durch die Einführung des neuen Parameters s nur teilweise realisieren.

3.6 Das asymmetrische Modell

Das bisher besprochene eindimensionale Modell zeigt keinerlei Vorzugsrichtung der Teilchenbewegung. Die Bewegung der Teilchen nach links oder rechts hängt lediglich von den lokalen Dichten ihrer Umgebung und dem Sensitivitätsparameter ab. Das Modell ist vollständig symmetrisch und der Teilchenfluß im stationären Zustand für sämtliche Dichten und Parameter gleich null. Bei biologischen Phänomenen wie zum Beispiel eindimensionalem Teilchentransport in Ionenkanälen verhält es sich jedoch häufig so, daß sich die Teilchen, etwa durch die Einwirkung eines äußeren Feldes, bevorzugt in eine bestimmte Richtung bewegen.
Um solche und ähnliche Effekte zu berücksichtigen, läßt sich ein weiterer kontinuierlicher Parameter $w \in]0, \infty[$ in das Modell einführen. Es gelte im gesamten Kapitel Wechselwirkungsreichweite $s = 1$. Dies ist jedoch keine notwendige Einschränkung. Der Parameter w kontrolliert den Grad der Vorzugsrichtung, indem er in bestimmter Weise als Multiplikator für die Gewichte $\exp(kD_i)$ dient.

3.6.1 Definition der Gewichte

Es bezeichne i den Platz eines zufällig herausgegriffenen Teilchens, an dem der Update vollzogen werden soll. $i-1$ und $i+1$ bezeichnen dann seinen linken und rechten Nachbarplatz. Die betreffenden Gewichte werden nun folgendermaßen verändert:

- Ist der Platz $i-1$ unbesetzt, so wird sein zugehöriges Gewicht mit dem Faktor $\frac{1}{w}$ multipliziert:

$$\exp(kD_{i-1}) \longrightarrow \frac{1}{w}\exp(kD_{i-1}) = \exp(kD_{i-1} - \tilde{w}) \quad . \tag{3.6.3.1}$$

- Das Gewicht des Platzes i bleibt unverändert:

$$\exp(kD_i) \longrightarrow \exp(kD_i) \quad . \tag{3.6.3.2}$$

- Ist der Platz $i+1$ unbesetzt, so wird sein zugehöriges Gewicht mit dem Faktor w multipliziert:

$$\exp(kD_{i+1}) \longrightarrow w\exp(kD_{i+1}) = \exp(kD_{i+1} + \tilde{w}) \quad . \tag{3.6.3.3}$$

Hierbei gilt stets $\tilde{w} = \ln(w)$.
Aus diesen Gewichten werden nun in bekannter Weise die Wahrscheinlichkeiten p_j gebildet. Zum Beispiel ist die Hüpfwahrscheinlichkeit für das Teilchen auf Platz i, auf den Platz $i-1$ zu springen, falls dieser unbesetzt ist, gegeben durch:

$$p_{i-1} = \frac{\frac{1}{w}\exp(kD_{i-1})}{\frac{1}{w}\exp(kD_{i-1}) + \exp(kD_i) + \Theta(i+1)} \quad ,$$

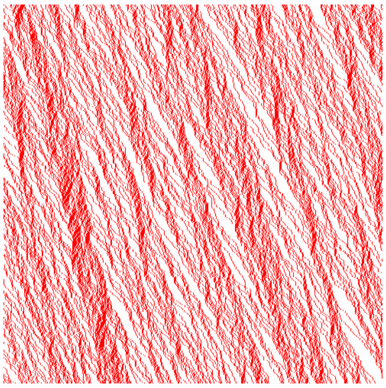
mit:

$$\Theta(i+1) := \begin{cases} 0 \quad , & \text{falls Platz} \quad i+1 \quad \text{bestetzt,} \\ w\exp(kD_{i+1}) \quad , & \text{falls Platz} \quad i+1 \quad \text{unbesetzt.} \end{cases}$$

3.6.2 Raum-Zeit-Diagramme

Aus der oben angeführten Definition wird ersichtlich, in welchem Maß der Parameter w die Vorzugsrichtung bestimmt. Wählt man $w \in]1, \infty[$, so werden sich die Teilchen bevorzugt nach rechts bewegen. Wählt man $w \in]0, 1[$, so bewegen sie sich bevorzugt nach links. Für den Parameter $w = 1$ wird das herkömmliche Modell ohne Vorzugsrichtung reproduziert.
Anhand von Computersimulationen soll nun zunächst das Raum-Zeit-Verhalten des Systems untersucht werden. Dargestellt ist ein Gitter der Größe $L = 500$, bei einer Dichte von $\rho = 0.3$. Die Simulation umfaßt 60000 Zeitschritte, hierbei wird jedoch nur jeder 150. Schritt graphisch ausgegeben (siehe 3.1). Abb. 3.40 zeigt das System für den kleinen Sensitivitätsparameter $k = 1$, und einen großen Asymmetrieparameter $w = 10$. Wie man sieht, besteht eine ziemlich starke Drift der Teilchen nach

Zeit $\downarrow$

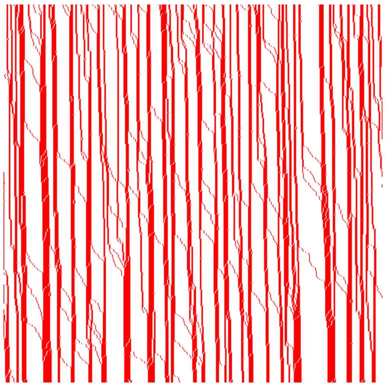


$\rightarrow$ Raum

Abbildung 3.40: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $k = 1$, $w = 10$

rechts. Es bilden sich kaum geordnete Strukturen oder Hochdichtebereiche aus. Dies war aufgrund des kleinen Parameters k zu erwarten.
In Abb. 3.41 ist nun das Verhalten des Systems für einen großen Sensitivitätsparameter $k = 10$ und einen großen Asymmetrieparameter $w = 10$ dargestellt. Hier setzt sich die Tendenz zur Clusterbilung gegenüber der Drift durch. Es bilden sich mehrere große Cluster aus, die jedoch eine leichte Drift nach rechts besitzen. Zwischen den großen Clustern bewegen sich vereinzelte Teilchen mit einer starken Drift nach rechts.
Das Verhalten ändert sich jedoch wieder erheblich, wenn man nun den Asymmetrieparameter w weiter erhöht. Abb. 3.42 zeigt das Verhalten des Systems für einen Asymmetrieparameter $w = 20$, bei gleichem $k = 10$. Die Cluster haben sich fast vollständig wieder aufgelöst, und die Teilchendrift nach rechts setzt sich durch.
Als Ergebnis hieraus läßt sich festhalten, das der Asymmetrieparameter in der Lage ist, die Vorzugsrichtung der Teilchen zu steuern. Auch kann er, hinreichend groß gewählt, selbst bei großem Sensitivitätsparameter k, die Tendenz zur Clusterbildung fast vollständig unterdrücken.
Im nächsten Abschnitt sollen nun zunächst einige Clusterverteilungen untersucht

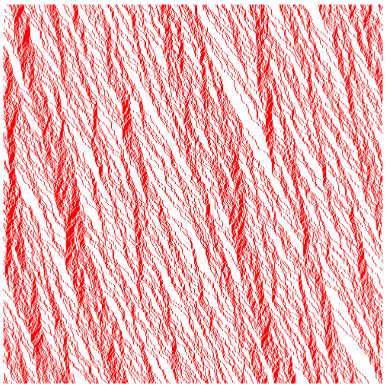
Zeit ↓



→ Raum

Abbildung 3.41: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $k = 10$, $w = 10$

Zeit ↓



→ Raum

Abbildung 3.42: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $k = 10$, $w = 20$

werden.

3.6.3 Clustergrößenverteilungen

In Abb. 3.43 ist für ein System der Größe $L = 5000$ und eine Dichte $\rho = 0.3$ der Vergleich der Asymmetrieparameter $w = 1, 5, 10$ und 20 für den niedrigen Sensitivitätsparameter $k = 1$ dargestellt. Wie zu erwarten war, unterscheiden sich die Verteilungen kaum voneinander. Es existieren keine langreichweitigen Korrelationen zwischen den Teilchen, und es gibt keine Tendenz zur Clusterbildung. Die starke Teilchendrift treibt die Teilchen noch stärker auseinander, so daß der exponentielle Abfall noch stärker ist als im symmetrischen Fall.
Erhebliche Unterschiede ergeben sich, wenn man die Verteilungen für ein größeres k vergleicht. In Abb. 3.44 ist daher der Vergleich für dasselbe System wie oben, nur mit einem Sensitivitätsparameter $k = 10$ gezeigt. Die Verteilung für $w = 5$ hat einen ähnlichen Verlauf wie die Verteilung im symmetrischen Fall. Jedoch ist das

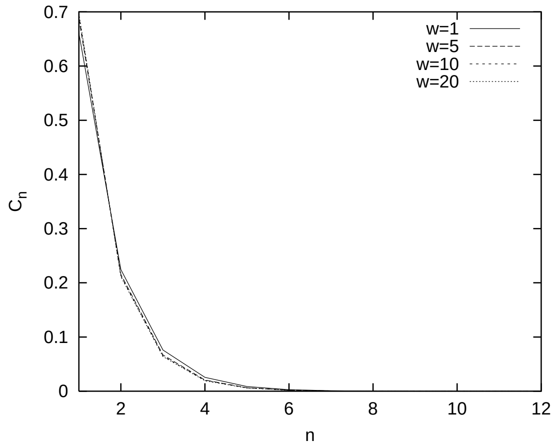


Abbildung 3.43: Vergleich der Verteilungen für verschiedene w; $\rho = 0.3$, $k = 1$

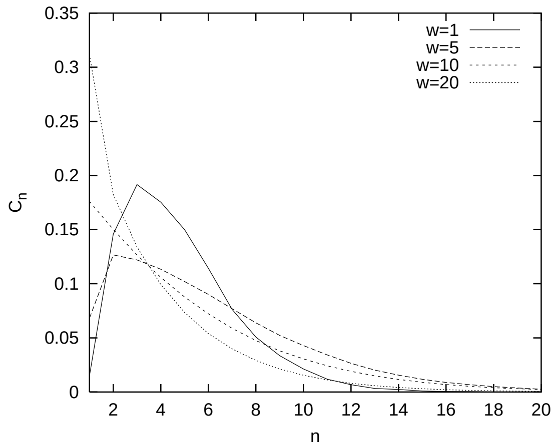


Abbildung 3.44: Vergleich der Verteilungen für verschiedene w; $\rho = 0.3$, $k = 10$

Maximum schwächer und die Verteilung ist hier homogener. Ferner ist das Maximum in Richtung kleinerer Clustergrößen verschoben. Für die Parameter $w = 10$ und $w = 20$ ergibt sich ein völlig anderes Verhalten. Die Tendenz zur Clusterbildung wird vollständig durch die Teilchendrift unterdrückt.Das Maximum der Verteilung liegt bei der Clustergröße eins und das Abfallverhalten ist wieder rein exponentiell, wie sich am logarithmischen Auftrag in Abb. 3.45 erkennen läßt.
Abschließend sind in Abb. 3.46 die Verteilungen für $k = 10$ für die gleichen Werte des Asymmetrieparameters w wie in Abb. 3.44 bei einer Dichte von $\rho = 0.7$ gezeigt. Der Verlauf der Verteilungen ist im wesentlichen mit denen aus Abb. 3.44 identisch, auch hier wird bei größer werdendem Asymmetrieparameter die Tendenz zur Clusterbildung durch die Teilchendrift fast vollständig unterdrückt. Das Maximum der Verteilung wandert auf die Clustergröße eins zurück.
Um ein quantitatives Maß für die Stärke der Teilchendrift zu erlangen, wird im nächsten Abschnitt eine weitere Meßgröße eingeführt.

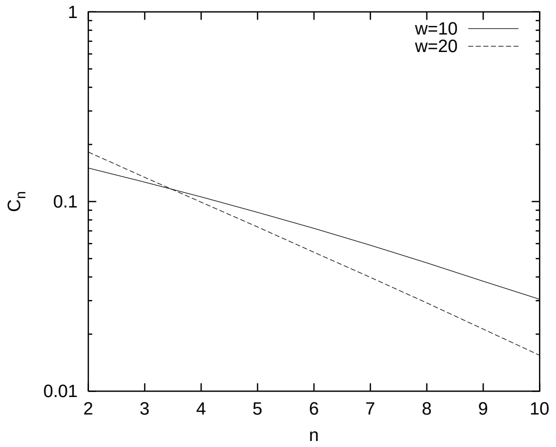


Abbildung 3.45: einfach-logarithmischer Auftrag für $w = 10$ und $w = 20$; $\rho = 0.3$, $k = 10$

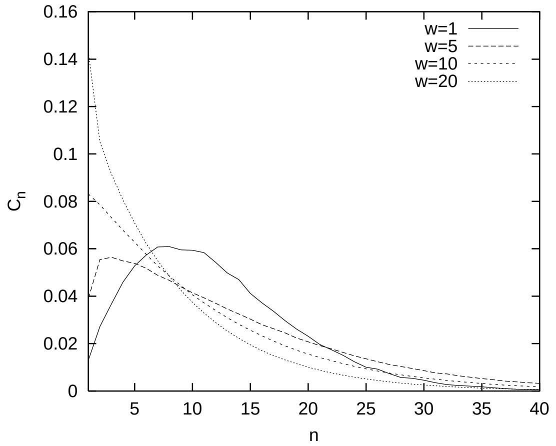


Abbildung 3.46: Vergleich der Verteilungen für verschiedene w; $\rho = 0.7$, $k = 10$

3.6.4 Teilchenstrom und Fundamentaldiagramm

Die zentrale Meßgröße für die Stärke der Teilchenbewegung in eine Richtung ist der *Teilchenstrom* oder *Teilchenfluß* f. Er ergibt sich aus dem Produkt von Teilchendichte ρ und mittlerer Teilchengeschwindigkeit v im stationären Zustand. Die Geschwindigkeit v ergibt sich numerisch als gemittelte Nettobewegung der Teilchen in eine Richtung pro Zeitschritt im stationären Zustand. Die wichtigste Kenngröße zur Beschreibung des Teilchenstroms oder Teilchentransports ist das sogenannte *Fundamentaldiagramm*, das den Teilchenfluß f in Abhängigkeit von der Teilchendichte ρ angibt. Für das symmetrische Modell, das heißt $w = 1$, gilt natürlich für sämtliche Dichten $f(\rho) = 0$.

Abb. 3.47 zeigt verschiedene Fundamentaldiagramme für ein System der Größe $L = 1000$ und bei einer Meßschrittweite von 0.02 Dichteeinheiten. Für den Parameter $k = 1$ sind hier die Fundamentaldiagramme für die Werte $w = 2, 5, 10$ und

20 des Asymmetrieparameters aufgetragen. Alle vier Fundamentaldiagramme sind

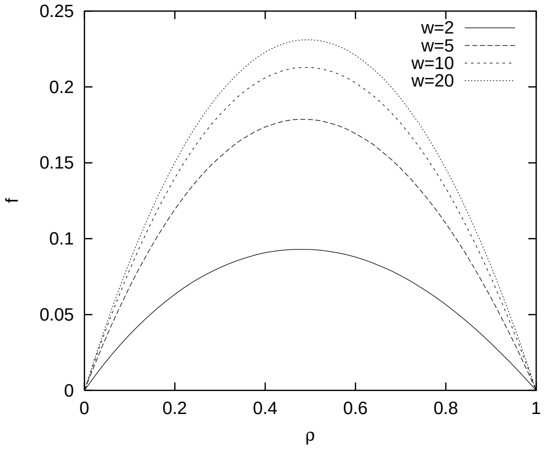


Abbildung 3.47: Vergleich der Fundamentaldiagramme für verschiedene w; $k = 1$

annähernd symmetrisch um $\rho = \frac{1}{2}$. Erhöht man w von 2 auf 5, so ergibt sich eine starke Zunahme des Stroms. Dieser ist jedoch bei weiterer Erhöhung von w nur noch geringfügig zu steigern.
Abb. 3.48 zeigt nun die Fundamentaldiagramme für dieselben Werte von w, jedoch für einen Sensitivitätsparameter von $k = 10$. Hier ergibt sich ein völlig anderes Bild.

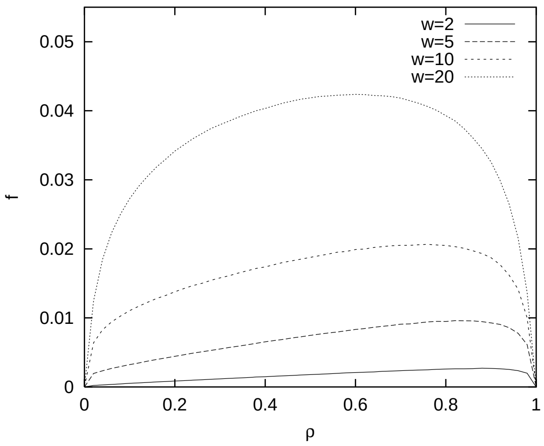


Abbildung 3.48: Vergleich der Fundamentaldiagramme für verschiedene w; $k = 10$

Die Werte des Stroms liegen für sämtliche Dichten und Parameterwerte w deutlich unter den vergleichbaren Werten aus Abb. 3.47 für den Parameter $k = 1$. Auch sind die Fundamentaldiagramme nicht mehr symmetrisch um $\rho = \frac{1}{2}$. Weiterhin bemerkenswert ist, daß der mittlere Strom hier, im Gegensatz zu $k = 1$, mit wachsendem w deutlich zunimmt und keinem Sättigungswert entgegen strebt.
Im nächsten Abschnitt soll nun versucht werden, mit Hilfe des COMF-Verfahrens relevante Meßgrößen des asymmetrischen Modells analytisch zu beschreiben.

3.6.5 COMF II

Erneut hat man nun die Möglichkeit, mit Hilfe von COMF einen analytischen Zugang für das Problem zu finden. Neben der Clusterverteilung ist es mit diesem Verfahren möglich, den Strom für eine vorgegebene Dichte im stationären Zustand zu errechnen. Daher ist man auch in der Lage, Fundamentaldiagramme zu erstellen. Dafür müssen jedoch zunächst die neuen COMF-Gleichungen aufgestellt und gelöst werden.
Alle Notationen seien wie in Abschnitt 3.3. Zunächst ergeben sich durch die Definition des asymmetrischen Modells neue lokale Übergangswahrscheinlichkeiten, die in Anhang B aufgeführt sind. Als nächstes werden die Wahrscheinlichkeiten $P_{t+\frac{1}{N}}(j)$ aus den Wahrscheinlichkeiten $P_t(j)$ berechnet. Die resultierenden Gleichungen finden sich in Anhang B. Aus $(B.7.2)$ folgen mit (3.3.3.3) die COMF-Gleichungen des stationären Zustands:

$$
\begin{aligned}
P_0 &= \frac{\tilde{c}_1}{2}P_0 + \frac{\tilde{c}_2}{2}P_1 \quad , && (3.6.3.4)\\
P_1 &= \frac{\tilde{c}_4}{2}P_0 + \frac{\tilde{c}_3}{2}P_1 + \frac{\tilde{c}_5}{2}P_2 \quad , && (3.6.3.5)\\
P_2 &= \frac{\tilde{c}_7}{2}P_1 + \frac{\tilde{c}_6}{2}P_2 + \frac{\tilde{c}_5}{2}P_3 \quad , && (3.6.3.6)\\
P_j &= \frac{\tilde{c}_8}{2}P_{j-1} + \frac{\tilde{c}_6}{2}P_j + \frac{\tilde{c}_5}{2}P_{j+1} \quad , \qquad \forall_{j>2} \quad . && (3.6.3.7)
\end{aligned}
$$

Wiederum sind die Faktoren $\tilde{c}_i$ in bestimmter Weise miteinander verknüpft:

$$
\begin{aligned}
\tilde{c}_1 + \tilde{c}_4 &= 2 \quad , && (3.6.3.8)\\
\tilde{c}_2 + \tilde{c}_3 + \tilde{c}_7 &= 2 \quad , && (3.6.3.9)\\
\tilde{c}_5 + \tilde{c}_6 + \tilde{c}_8 &= 2 \quad . && (3.6.3.10)
\end{aligned}
$$

Hieraus ergeben sich folgende Rekursionsgleichungen für die Gewichte P_j:

$$
\begin{aligned}
\tilde{c}_4 P_0 &= \tilde{c}_2 P_1 \quad , \\
\tilde{c}_7 P_1 &= \tilde{c}_5 P_2 \quad , \\
\tilde{c}_8 P_j &= \tilde{c}_5 P_{j+1} \quad , \qquad \forall_{j>2} \quad .
\end{aligned}
\qquad (3.6.3.11)
$$

Diese Rekursionsgleichungen haben die gleiche Gestalt wie in (3.3.3.13). Mit (3.6.3.11) erhält man aus (3.3.3.12):

$$
\frac{1}{\rho} = 1 + \frac{\tilde{c}_4}{\tilde{c}_2}P_0 \left\{ 1 + \frac{\tilde{c}_7}{\tilde{c}_5}\sum_{j=0}^{\infty}(j+2)(\frac{\tilde{c}_8}{\tilde{c}_5})^j \right\} \quad . \qquad (3.6.3.12)
$$

Da man für alle $k \in [0,\infty[$ und alle $w \in]0,\infty[$ zeigen kann, daß gilt: $\frac{\tilde{c}_8}{\tilde{c}_5} < 1$, folgt aus (3.6.3.12):

$$
\frac{1}{\rho} = 1 + \frac{\tilde{c}_4}{\tilde{c}_2}P_0 \left\{ 1 + \frac{\tilde{c}_7}{\tilde{c}_5}\left(\frac{1}{(1-\frac{\tilde{c}_8}{\tilde{c}_5})^2} + \frac{1}{(1-\frac{\tilde{c}_8}{\tilde{c}_5})}\right) \right\} \quad . \qquad (3.6.3.13)
$$

Mit (3.6.3.11) läßt sich P_1 in Abhängigkeit von P_0 darstellen:

$$P_1 = \frac{-((p_9+p_5)(1-P_0)+(p_{14}+p_{18})P_0)}{2((p_{11}+p_{12})-(p_9+p_5))} - \sqrt{(\frac{((p_9+p_5)(1-P_0)+(p_{14}+p_{18})P_0)}{2((p_{11}+p_{12})-(p_9+p_5))})^2 + \frac{(p_{11}+p_{12})(1-P_0)P_0}{((p_{11}+p_{12})-(p_9+p_5))}} \; . \qquad (3.6.3.14)$$

Aus (3.6.3.14) und (3.3.3.15) gewinnt man nun, bei vorgegebener Dichte ρ, wie in 3.3, eine implizite Bestimmungsgleichung für P_0, die numerisch zu lösen ist. Die Wahrscheinlichkeit C_n, einen Cluster der Größe n im stationären Zustand zu finden, ist durch (3.3.3.17) gegeben. Darüber hinaus ergibt sich der Strom nach rechts im stationären Zustand aus COMF zu:

$$\begin{aligned} f(\rho, P_0) &= \rho\left\{P_0(1-P_0-P_1)(p_{14}-p_{18}) + P_0P_1(p_{16}-p_{20}) + {P_1}^2(p_{12}-p_{11})\right\} \\ &\quad + \rho\left\{P_1(1-P_0-P_1)((p_6-p_5)+(p_9-p_8)) + (1-P_0-P_1)^2(p_3-p_2)\right\} . \end{aligned} \qquad (3.6.3.15)$$

Um die Leistungsfähigkeit von COMF für das asymmetrische Modell zu untersuchen, werden zunächst einige mittels (3.3.3.17) gewonnene Clusterverteilungen mit aus Simulationen stammenden Verteilungen verglichen.
In Abb. 3.49 ist der Vergleich der Clusterverteilungen, bei einer Dichte von $\rho = 0.3$ und einem kleinen Sensitivitätsparameter von $k = 1$, für die Asymmetrieparameter $w = 5, 10$ und 20 dargestellt. Wie schon in Abb. 3.43 zu sehen war, unterscheiden

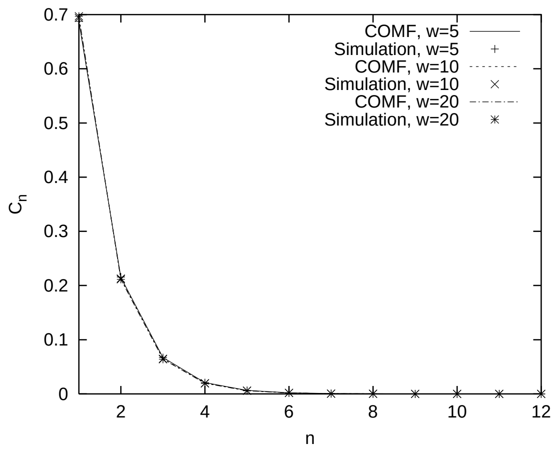


Abbildung 3.49: Vergleich von COMF mit Simulationen für verschiedene w; $\rho = 0.3$, $k = 1$

sich die Verteilungen für kleine Parameter k kaum voneinander. COMF ist in jedem der drei Fälle in der Lage, die Verteilungen aus den Simulationen sehr gut zu reproduzieren.
Interessanter wird der Sachverhalt für ein größeres k. Abb. 3.50 zeigt den Vergleich der Verteilungen für dieselben Werte des Asymmetrieparameters wie in Abb. 3.49,

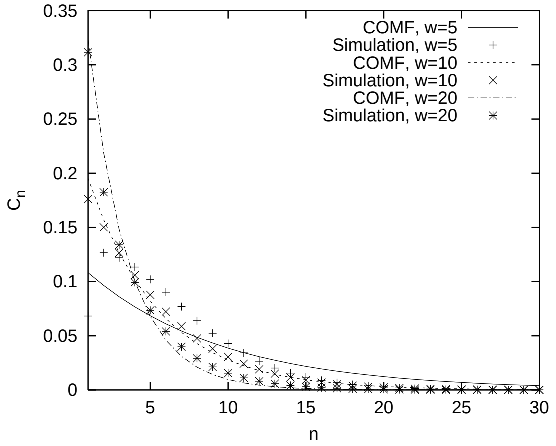


Abbildung 3.50: Vergleich von COMF mit Simulationen für verschiedene w; $\rho = 0.3$, $k = 10$

jedoch für ein $k = 10$. Für $w = 5$ ist die aus der Simulation stammende Verteilung nicht rein exponentiell, die Korrelationen zwischen den Teilchen sind aufgrund des hohen Sensitivitätsparameters zu groß, um von COMF erfaßt zu werden. Für $w = 10$ und $w = 20$ setzt sich jedoch die Teilchendrift gegen die Tendenz zur Clusterbildung durch, die Verteilungen aus den Simulationen sind rein exponentiell. COMF ist hier in der Lage, die Verteilungen in zufriedenstellender Weise wiederzugeben.
Als nächstes sollen nun Fundamentaldiagramme aus Simulationen mit aus COMF erechneten verglichen werden. Abb. 3.51 zeigt den Vergleich der Fundamentaldiagramme für einen Sensitivitätsparameter von $k = 1$ und dieselben Werte der Parameter w wie in Abb. 3.47. In allen vier Fällen wird der Verlauf der Kurven

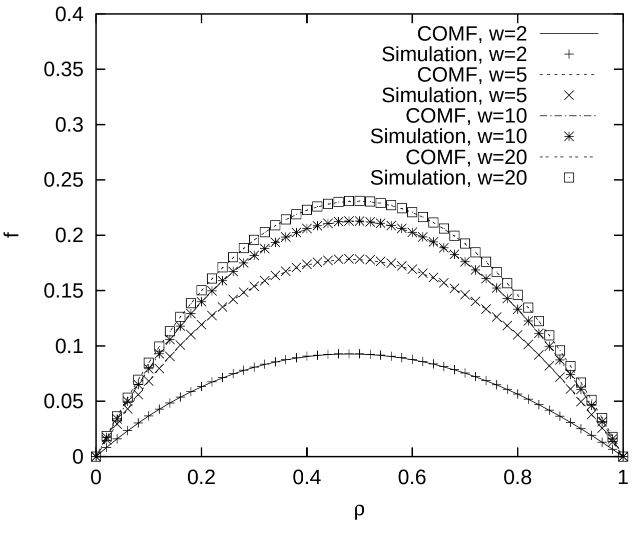


Abbildung 3.51: Vergleich der Fundamentaldiagramme aus Simulationen und COMF für verschiedene w; $k = 1$

durch COMF annähernd exakt wiedergegeben. COMF ist, wie zuvor bei kleinem k, unabhängig von w, stets in der Lage, die auftretenden Größen sehr gut zu reproduzieren.
In Abb. 3.52 werden nun die Fundamentaldiagramme für den großen Parameter $k = 10$ und die Werte $w = 2, 5, 10$ und 20 verglichen. Hier ist die Übereinstimmung

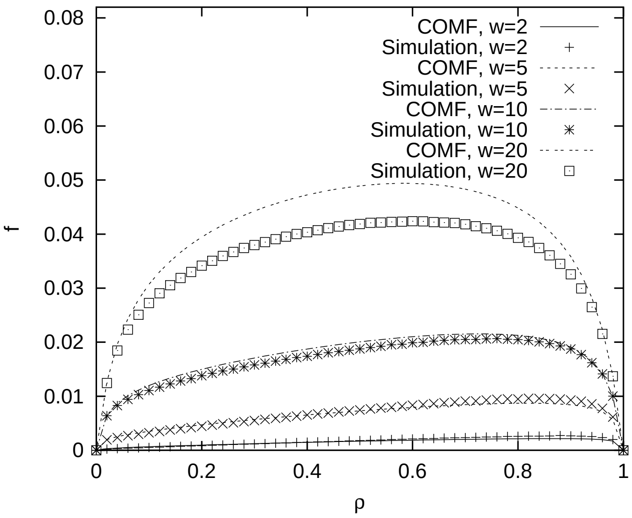


Abbildung 3.52: Vergleich der Fundamentaldiagramme aus Simulationen und COMF für verschiedene w; $k = 10$

aus Simulation und COMF nicht durchweg befriedigend. Während Simulation und Rechnung für $w = 2$ und $w = 5$ noch sehr gut übereinstimmen, so ergeben sich für $w = 10$ bereits recht deutliche Abweichungen zwischen den Kurven. Das durch COMF erstellte Fundamentaldiagramm gibt den Strom durchweg zu hoch an. Jedoch liefert COMF auch hier eine teilweise zufriedenstellende Beschreibung. Für den Asymmetrieparameter $w = 20$ ist die Abweichung zwischen Simulation und Rechnung jedoch sehr hoch. Der mittlere Strom wird durch COMF in nahezu allen Meßpunkten stark überschätzt. Lediglich an den Rändern der Kurve ist die Übereinstimmung zwischen Theorie und Simulation gut. Im Dichtebereich um $\rho = \frac{1}{2}$ ist die durch COMF erstellte Kurve lediglich als Obergrenze der eigentlichen Kurve zu gebrauchen.

Kapitel 4

Das $4p$-Modell

4.1 Einführung und Definition des Modells

In diesem Kapitel soll ein völlig neues eindimensionales Modell betrachtet werden. Es handelt sich dabei um einen Prozeß mit einer sehr einfachen Regelstruktur. Die lokale Wechselwirkungsreichweite beträgt drei Plätze. Es lassen sich verschiedene Interpretationsmöglichkeiten für das Modell finden, auf die im Laufe des Kapitels näher eingegangen werden soll. Dieses Minimalmodell ist jedoch eher unter theoretischen Gesichtspunkten interessant, da es die Möglichkeit verschiedener analytischer Zugänge liefert.
Der in den vorangegangenen Kapiteln besprochene eindimensionale Zellularautomat hat, wie bereits in 3 erläutert, einen $2^5 = 32$ dimensionalen lokalen Zustandsraum, und ist daher für weiterführende exakte Rechnungen eher ungeeignet. Für das $4p$-Modell ist man jedoch aufgrund des $2^3 = 8$ dimensionalen lokalen Zustandsraumes in der Lage, mit Hilfe der *Matrix-Produkt-Ansatz*-Technik (MPA) exakte Ergebnisse zu erzielen. Ferner lassen sich zusätzlich alle relevanten Größen mittels COMF in geschlossener Form angeben. Hierbei ist es nicht erforderlich, mittels numerischer Methoden implizite Gleichungen zu lösen. Ziel dieses Kapitels ist es, die Ergebnisse aus Simulationen mit Ergebnissen aus COMF und MPA-Technik zu vergleichen, um die analytischen Zugänge auf ihre Anwendbarkeit zu überprüfen.
Das Modell ist auf folgende Weise definiert:

- Am Anfang werden N Teilchen auf einem Gitter der Länge L zufällig verteilt. Die Dichte $\rho = \frac{N}{L}$ ist eine Erhaltungsgröße. Es gelten periodische Randbedingungen.

- Es wird zufällig ein Teilchen herausgegriffen, sein Gitterplatz sei mit i bezeichnet. Die Dynamik wird mittels zufällig sequentiellem Update realisiert.

- In Abhängigkeit von der lokalen Besetzungszahlkonfiguration seiner nächsten Nachbarplätze bewegt sich das Teilchen in bestimmter Weise:

    1. Sind beide nächsten Nachbarplätze besetzt, so wird ein neues Teilchen ausgewählt. Das Modell läßt keine Doppelbesetzung zu.

2. Sind beide nächsten Nachbarplätze unbesetzt, so springt das Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit p_1 auf den Platz $i+1$, und mit der Wahrscheinlichkeit p_2 auf den Platz $i-1$. Hierbei gilt $p_1 + p_2 \leq 1$. Es verbleibt auf Platz i mit der Wahrscheinlichkeit $1-(p_1+p_2)$ (siehe Abb. 4.1).

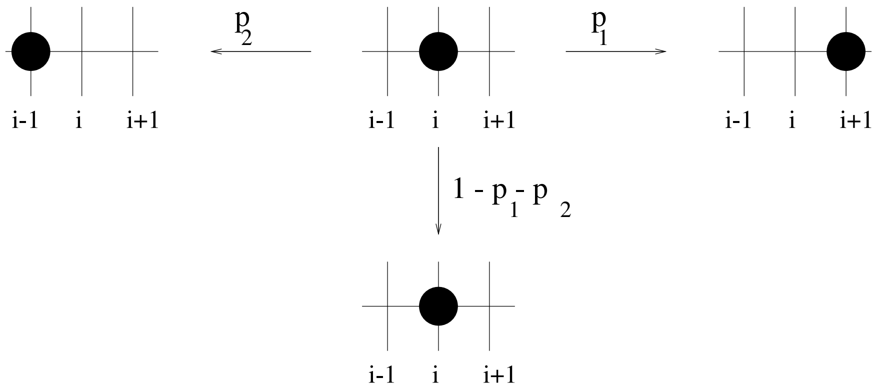


Abbildung 4.1: Nächste Nachbarplätze unbesetzt

3. Ist lediglich Platz $i-1$ besetzt, so springt das Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit p_3 auf Platz $i+1$, wobei gilt $p_3 \leq 1$. Es verbleibt auf Platz i mit der Wahrscheinlichkeit $1-p_3$ (siehe Abb. 4.2).
4. Wenn nur Platz $i+1$ besetzt ist, springt das Teilchen mit der Wahrscheinlichkeit p_4 auf Platz $i-1$, und verbleibt auf Platz i mit der Wahrscheinlichkeit $1-p_4$. Es gilt dabei natürlich $p_4 \leq 1$ (siehe Abb. 4.2).

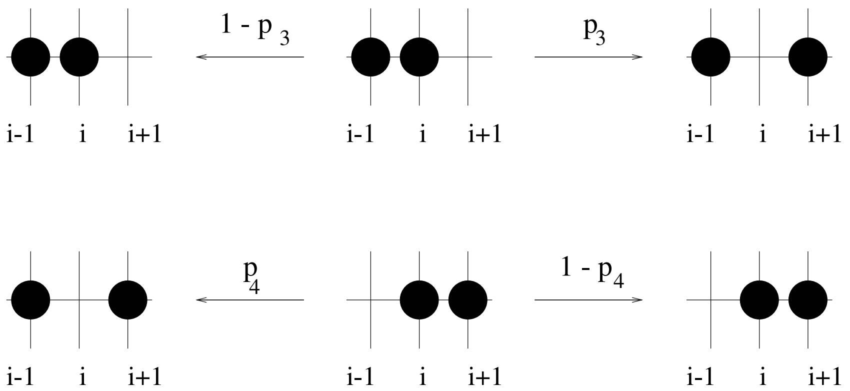


Abbildung 4.2: Ein nächster Nachbarplatz besetzt

- Die Prozedur wird mit einem neuen Teilchen wiederholt.

Aus dieser Definition ergeben sich nun in Spezialfällen einige Interpretationsmöglichkeiten. Als Beispiele lassen sich anführen:

- Das symmetrische Modell mit $p_1 = p_2 \equiv p$ und $p_3 = p_4 \equiv q$. Im Falle $p > q$ läßt sich das Modell dann als vereinfachte Version des bisher besprochenen eindimensionalen Zellularautomaten interpretieren. Die Teilchen haben dann die Tendenz, in Nachbarschaft anderer Teilchen zu verbleiben. Im Falle $p < q$ ergibt sich ein repulsives Modell.

- Das total asymmetrische Modell mit zum Beispiel $p_2 = p_4 = 0$. Die Teilchen bewegen sich nur in eine Richtung; haben aber im Falle $p_1 > p_3$ eine Affinität zu benachbarten Teilchen. Eine mögliche Interpretation aus dem Bereich der granularen Materie ist das Verhalten von feuchten Sandkörnern, die eine gekippte Röhre hinuntergleiten.

Im nächsten Abschnitt soll mit Hilfe einiger Raum-Zeit-Diagramme ein Eindruck des zeitlichen Verlaufs des Modells gewonnen werden.

4.2 Raum-Zeit-Diagramme des $4p$-Modells

Es werden Systeme der Größe $L = 500$ über einen Zeitraum von insgesamt 60000 Updates betrachtet. Hierbei wird jedoch nur jeder 150-te Zeitschritt graphisch ausgegeben.
Abb. 4.3 zeigt das Modell im symmetrischen Fall. Die Werte der Parameter liegen bei $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$ und $p_3 = p_4 = \frac{1}{5}$, bei einer Dichte von $\rho = \frac{1}{2}$. Das System zeigt

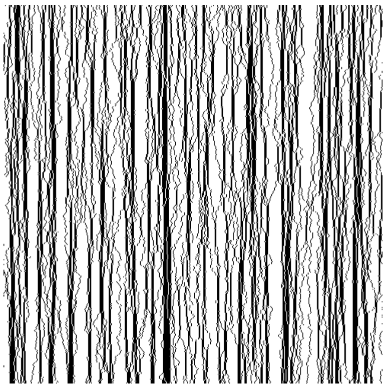
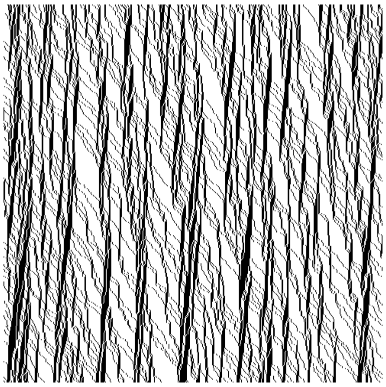


Abbildung 4.3: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$, $p_3 = p_4 = \frac{1}{5}$

eine Tendenz zur Clusterbildung. Jedoch sind die Cluster weniger ausgeprägt als im Falle des oben besprochenen Zellularautomaten für große Schwarmparameter k. Offensichtlich existiert kein Teilchenfluß.
Das Verhalten des Systems ändert sich, wenn man den total asymmetrischen Fall betrachtet. In Abb. 4.4 ist das Vehalten des Systems bei einer Dichte $\rho = 0.3$ für die Parameter $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = \frac{1}{5}$ und $p_4 = 0$ dargestellt. Es findet ein ziemlich starker Teilchenfluß nach rechts statt, daneben bilden sich jedoch recht stabile lokale Hochdichtebereiche aus.
Zwischen diesen beiden diskutierten Spezialfällen gibt es eine Reihe weiterer Realisierungsmöglichkeiten des Modells. Zum Beispiel läßt sich die Parameterkombination

Zeit ↓



→ Raum

Abbildung 4.4: Raum-Zeit-Diagramm, $\rho = 0.3$, $p_1 = 1$, $p_2 = 0$, $p_3 = \frac{1}{5}, p_4 = 0$

$p_{1/2} = \frac{1}{2} \pm \epsilon, \quad \epsilon \in]0, \frac{1}{2}[$ und $p_{3/4} = \frac{1}{4} \pm \delta, \quad \delta \in]0, \frac{1}{4}[$ als Minimalversion des in 3.6 ausführlich besprochenen asymmetrischen Modells interpretieren.
In den nächsten beiden Kapiteln soll versucht werden, analytische Beschreibungsmöglichkeiten für das 4p-Modell zu finden.

4.3 COMF für das 4p-Modell

Auch für das $4p$-Modell ist man in der Lage, mit Hilfe des COMF-Verfahrens Clusterverteilungen und Fundamentaldiagramme zu errechnen. Wiederum seien alle Notationen wie in Abschnitt 3.3. Der große Unterschied zu den Rechnungen in Abschnitt 3.3 und Abschnitt 3.6.5 besteht in der Tatsache, daß aufgrund der kleineren Wechselwirkungsreichweite des Prozeßes lediglich die Größe P_0 zur Aufstellung der COMF-Gleichungen berücksichtigt werden muß.
Aus der Normierungsbedingung (3.3.3.1) folgt somit:

$$\sum_{j\geq 1}^{\infty} P_t(j) = 1 - P_t(0) \quad . \tag{4.3.4.1}$$

Die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten $P_{t+\frac{1}{N}}(j)$ aus den Wahrscheinlichkeiten $P_t(j)$ ist in Anhang C aufgeführt. Aus $(C.7.1)$ folgen im Limes $t \to \infty$ mit (3.3.3.3) die COMF-Gleichungen des stationären Zustands:

$$P_0 = \frac{a_1}{2} P_0 + \frac{a_2}{2} P_1 \quad , \tag{4.3.4.2}$$

$$P_1 = \frac{a_4}{2} P_0 + \frac{a_3}{2} P_1 + \frac{a_2}{2} P_2 \quad , \tag{4.3.4.3}$$

$$P_j = \frac{a_5}{2} P_{j-1} + \frac{a_3}{2} P_j + \frac{a_2}{2} P_{j+1} \quad , \qquad \forall_{j>1} \quad . \tag{4.3.4.4}$$

Wiederum lassen sich Beziehungen zwischen den Faktoren a_i angeben:

$$a_1 + a_4 = 2 \quad , \tag{4.3.4.5}$$

$$a_5 + a_2 + a_3 = 2 \quad . \tag{4.3.4.6}$$

Hieraus ergeben sich folgende Rekursionsgleichungen für die Gewichte P_j:

$$\begin{array}{rcll} a_4 P_0 & = & a_2 P_1 & , \\ a_5 P_j & = & a_2 P_{j+1} & , \qquad \forall_{j>2} \quad . \end{array} \tag{4.3.4.7}$$

Mit (3.3.3.12) ergibt sich aus den Rekursionsgleichungen (4.3.4.7) eine Beziehung zwischen der Dichte ρ und P_0:

$$\frac{1}{\rho} = 1 + \frac{a_4}{a_2} P_0 \left\{ \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) (\frac{a_5}{a_2})^j \right\} \quad . \tag{4.3.4.8}$$

Für jede sinnvolle Definition der Parameter p_i ist $\frac{a_5}{a_2} < 1$. Somit folgt aus (4.3.4.8):

$$\frac{1}{\rho} = 1 + \frac{a_4}{a_2} P_0 \frac{1}{(1 - \frac{a_5}{a_2})^2} \quad . \tag{4.3.4.9}$$

Aus (4.3.4.9) ergibt sich eine quadratische Gleichung für P_0. Ihre Lösungen lauten:

$$\begin{array}{rcl} P_{0_+} & = & 1 + \dfrac{p_3 + p_4}{2\rho((p_1+p_2) - (p_3+p_4))} \\ & & + \sqrt{1 + \dfrac{\frac{p_3+p_4}{\rho} - (p_1+p_2)}{(p_1+p_2) - (p_3+p_4)} + \dfrac{(p_3+p_4)^2}{4\rho^2((p_1+p_2) - (p_3+p_4))^2}} \quad , \end{array} \tag{4.3.4.10}$$

und

$$\begin{array}{rcl} P_{0_-} & = & 1 + \dfrac{p_3 + p_4}{2\rho((p_1+p_2) - (p_3+p_4))} \\ & & - \sqrt{1 + \dfrac{\frac{p_3+p_4}{\rho} - (p_1+p_2)}{(p_1+p_2) - (p_3+p_4)} + \dfrac{(p_3+p_4)^2}{4\rho^2((p_1+p_2) - (p_3+p_4))^2}} \quad . \end{array} \tag{4.3.4.11}$$

Im Falle $p_1 + p_2 > p_3 + p_4$ ist P_{0_-} die physikalisch sinnvolle Lösung, im Falle $p_1 + p_2 < p_3 + p_4$ ist es P_{0_+}.
Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Clustergrößen ergibt sich in bekannter Weise aus P_0:

$$C_n = (1 - P_0) {P_0}^{n-1} \quad . \tag{4.3.4.12}$$

Der Teilchenfluß nach rechts ergibt sich in Abhängigkeit von P_0 aus folgender Formel:

$$f = \rho \left\{ (p_1 - p_2)(1 - P_0)^2 + (p_3 - p_4) P_0 (1 - P_0) \right\} \quad . \tag{4.3.4.13}$$

Im nächsten Abschnitt soll nun der analytische Zugang mittels MPA-Technik beschrieben werden.

4.4 Matrix-Produkt-Ansatz (MPA)

Der sogenannte *Matrix-Produkt-Ansatz* ist bisher besonders erfolgreich bei der Untersuchung von Grundzuständen von Quanten-Spin-Ketten eingesetzt worden [25, 28, 26, 27, 29]. In letzter Zeit wurde diese Technik jedoch auch verstärkt zur Untersuchung eindimensionaler stochastischer Prozesse angewandt. Hier ist vor allem die Lösung des *total asymmetrischen einfachen Exklusionsprozesses* (TASEP) zu nennen [30, 31, 32, 21].

Zunächst soll das grundlegende Prinzip des MPA erläutert werden. Ausgangspunkt ist die sogenannte *Master-Gleichung* [33], die bereits früher implizit benutzt wurde, an dieser Stelle jedoch ausführlich diskutiert werden soll. Es bezeichne $w(\{\tau'\}|\{\tau\})$ die Übergangsrate zwischen den mikroskopischen Konfigurationen

$$\{\tau\} = \{\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_L\}$$

(hierbei bezeichnet τ_i die Besetzungszahl des i-ten Platzes eines Systems der Länge L) und $\{\tau'\}$. Diese Übergangsraten sind durch die Definition des zugrundeliegenden stochastischen Prozesses gegeben. Die Master-Gleichung beschreibt nun die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\{\tau\}, t)$ der mikroskopischen Konfigurationen $\{\tau\}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{\tau\}, t) = \sum_{\{\tau'\}} - \underbrace{w(\{\tau'\}|\{\tau\}) P(\{\tau\}, t)}_{\text{Verlust}} + \underbrace{w(\{\tau\}|\{\tau'\}) P(\{\tau'\}, t)}_{\text{Gewinn}} \quad . \tag{4.4.4.1}$$

Die Master-Gleichung ist eine Bilanzgleichung, in der sämtliche Veränderungen eines Zustands zum Zeitpunkt t verzeichnet sind. Es werden sämtliche Abgänge aus dem Zustand und sämtliche Eingänge in den Zustand notiert.

Der nächste Schritt besteht nun darin, die Master-Gleichung in eine Form umzuschreiben, die der Schrödinger Gleichung in imaginärer Zeit ähnelt [34]. Hierzu wird zunächst ein spezieller ket-Zustand $|\, P_L(t) \,\rangle$ definiert. Man wählt eine orthonormale Basis des Konfigurationsraums $\{\tau\}$,

$$|\, \{\tau\} \,\rangle = |\, \tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_L \,\rangle \quad , \tag{4.4.4.2}$$

mit

$$\left\langle \{\tau'\} \middle| \{\tau\} \right\rangle = \delta_{\{\tau'\},\{\tau\}} \quad . \tag{4.4.4.3}$$

Der ket-Zustand wird dann folgendermaßen definiert:

$$|\, P_L(t) \,\rangle = \sum_{\{\tau\}} P(\{\tau\}, t) \,|\, \{\tau\} \,\rangle \quad . \tag{4.4.4.4}$$

Es läßt sich leicht zeigen, daß sich für stochastische Prozesse mit kontinuierlicher Zeitentwicklung (zufällig sequentiellem Update) die Master-Gleichung (4.4.4.1) in folgender Weise zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung des ket-Zustandes $|\, P_L(t) \,\rangle$ umschreiben läßt:

$$\frac{\partial}{\partial t} |P_L(t)\rangle = -\hat{H}_L |P_L(t)\rangle \quad . \tag{4.4.4.5}$$

In vielen Fällen ist hierbei der Operator $\hat{H}_L$ ein stochastischer Hamilton-Operator der Gestalt:

$$\hat{H}_L(r) = \hat{h}_{\mathrm{left}}(r) + \sum_{k=1}^{L-r+1} \hat{h}_{k,k+1,\dots,k+r-1} + \hat{h}_{\mathrm{right}}(r) \quad , \tag{4.4.4.6}$$

im Fall von speziellen Wechselwirkungen an den Rändern. Diese Wechselwirkungen stammen in der Regel daher, daß man Teilchen an den Rändern des Systems zuführt oder entfernt. Für periodische Randbedingungen ergibt sich:

$$\hat{H}_L^{(p)}(r) = \sum_{k=1}^{L} \hat{h}_{k,k+1,\dots,k+r-1} \quad . \tag{4.4.4.7}$$

Der Index r bezeichnet hierbei die Reichweite der Wechselwirkung im Bulk, mit anderen Worten $\hat{h}_{k,k+1,\dots,k+r-1}$ wirkt auf r Plätze, beginnend bei Platz k. Die Matrixelemente der Operatoren $\hat{h}_{k,k+1,\dots,k+r-1}$ sind durch die lokalen Übergangsraten des zugrundeliegenden stochastischen Prozesses gegeben. $\hat{h}_{\mathrm{left}}(r)$ und $\hat{h}_{\mathrm{right}}(r)$ beschreiben die speziellen Wechselwirkungen, die auf die ersten und letzten $r-1$ Plätze des Systems wirken. Die Ähnlichkeit von (4.4.4.5) mit der Schrödinger Gleichung ist lediglich formal, da der Zustand $|P_L(t)\rangle$ bereits eine Wahrscheinlichkeitsdichte ist. Ferner ist zu beachten, daß der stochastische Hamilton Operator $\hat{H}_L$ nicht notwendig hermitesch ist.
Die Aufgabe im folgenden ist nun, den „Grundzustand“von $\hat{H}_L$ zu finden. Mit Grundzustand ist hier der Eigenvektor zum Eigenwert Null gemeint. Da $\hat{H}_L$ eine stochastische Matrix[1] ist, existiert ein solcher Eigenvektor stets [33]. Wie aus (4.4.4.5) ersichtlich, ist dieser Zustand zeitlich konstant und beschreibt daher den stationären Zustand des Systems. Im folgenden sei $|P_L\rangle_0$ als Eigenvektor zur Energie Null bezeichnet. Man beachte, daß im Gegensatz zum allgemeinen Fall bei Quantensystemen, die „Grundzustandsenergie“nicht von der Systemgröße L abhängt. In diesem Sinne kann man die stationären Zustände von stochastischen Hamilton Operatoren als verallgemeinerte *Optimum-Grundzustände* betrachten [35].
Unter gewissen Umständen läßt sich nun der Grundzustand $|P_L\rangle_0$ als Matrix-Produkt-Zustand schreiben. Nach [36] kann man im Falle von Wechselwirkungen an den Rändern den Grundzustand stets als Matrix-Produkt-Zustand angeben. Er hat dann die Gestalt:

$$|P_L\rangle_0 = \frac{1}{Z_L} \langle W|\mathcal{D}^{\otimes L}|V\rangle \quad . \tag{4.4.4.8}$$

[1] Eine stochastische Matrix besitzt folgende Eigenschaften:

1. Summe der Spalten gleich null,
2. Elemente der Hauptdiagonale nicht negativ,
3. Elemente der Nebendiagonalen nicht positiv.

Für periodische Randbedingungen muß man den Ansatz modifizieren, um Translationsinvarianz garantieren zu können:

$$|P_L\rangle_0 = \frac{1}{Z_L}\ \mathrm{Tr}[\mathcal{D}^{\otimes L}] \quad . \tag{4.4.4.9}$$

In beiden Fällen ist $\mathcal{D}$ ein Vektor der Dimension m, wobei m die Anzahl der möglichen Zustände eines Platzes bezeichnet. Die Komponenten D_i von $\mathcal{D}$ sind Matrizen, die auf einen Hilfsvektorraum A wirken. $|V\rangle \in A$ und $\langle W| \in A^*$ sind Vektoren aus A und seinem Dualraum A^*. Z_L bezeichnet die Normierungskonstante.
Ein Zustand wie in(4.4.4.9) muß jedoch nicht notwendig existieren. Da das zu untersuchende $4p$-Modell für periodische Randbedingungen definiert ist, sollen die folgenden analytischen Betrachtungen zur Lösung des Problems auf diesen Fall beschränkt bleiben. Ein Kriterium für die Existenz eines Zustandes wie in (4.4.4.9) ist der sogenannte *Cancelling-Mechanismus*, der im folgenden vorgestellt werden soll. Hierfür sind jedoch zunächst einige Begriffe einzuführen:
Definition: *Sei $\mathcal{X}(r)$ ein Spaltenvektor mit m^{r-1} Einträgen $X_{i_1,i_2,\ldots,i_{r-1}}$, wobei $i_\gamma \in \{1,2,\ldots,m\}$. Die $X_{i_1,i_2,\ldots,i_{r-1}}$ seien Matrizen, die auf den oben definierten Hilfsvektorraum A wirken. Hierbei bildet die Matrix $X_{i_1,i_2,\ldots,i_{r-1}}$ den $1+(i_{r-1}-1)+m(i_{r-2}-1)+\ldots+m^{r-2}(i_1-1)$-ten Eintrag des Vektors $\mathcal{X}(r)$.*
Mit dieser Definition folgt, als eine Verallgemeinerung eines Ergebnisses von Krebs und Sandow [36], nach [37] der Satz:
Satz: *Lassen sich m Matrizen D_i und m^{r-1} Matrizen $X_{i_1,i_2,\ldots,i_{r-1}}$ finden, so daß*

$$\hat{h}_{k,k+1,\ldots,k+r-1}(\overbrace{\mathcal{D}\otimes\mathcal{D}\otimes\cdots\otimes\mathcal{D}}^{r\text{ mal}}) = \mathcal{X}(r)\otimes\mathcal{D} - \mathcal{D}\otimes\mathcal{X}(r) \tag{4.4.4.10}$$

erfüllt ist. Dann ist $|P_L\rangle_0 = \mathrm{Tr}[\mathcal{D}^{\otimes L}]$ ein Eigenvektor von $\hat{H}_L^{(p)}(r)$ zum Eigenwert Null, das heißt ein stationärer Zustand des zugrundeliegenden stochastischen Prozeßes mit periodischen Randbedingungen.
Mit Hilfe des Cancelling-Mechanismus soll nun versucht werden, unter bestimmten Bedingungen einen stationären Zustand der Form $|P_L\rangle_0 = \mathrm{Tr}[\mathcal{D}^{\otimes L}]$ für das $4p$-Modell zu konstruieren. Der stochastische Hamiltonian des $4p$-Modells ist von der Form (4.4.4.7) mit $r=3$. Der lokale Operator $\hat{h}_{k-1,k,k+1}$ wirkt auf die Plätze $k-1,k,k+1$. Seine explizite Darstellung ist durch die Dynamik des Modells gegeben und lautet:

$$\hat{h}_{k-1,k,k+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(p_1+p_2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -p_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_4 & 0 & 0 & p_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -p_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{4.4.4.11}$$

Hierbei liegt dieser Matrix die lokale Basis

$$\{|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle\} \tag{4.4.4.12}$$

zugrunde (die Einträge 0 und 1 bezeichnen die Besetzungszahlen des jeweiligen Platzes). Für den stationären Zustand ergibt sich ein Ansatz von der Form (4.4.4.9), mit $\mathcal{D} = (E, D)^t$ und Matrizen E, D. Dies entspricht einer großkanonischen Beschreibung, da in (4.4.4.9) Zustände mit unterschiedlicher Teilchenzahl vorkommen. Wie nun aus dem oben angeführten Satz folgt, ist $|P_L\rangle_0$ ein stationärer Zustand des zugrundeliegenden Systems, wenn sich 6 Operatoren E, D, X_{11}, X_{12}, X_{21} und X_{22} finden lassen, die die aus dem Cancelling Mechanismus stammenden Relationen erfüllen. Diese Relationen lauten explizit:

$$\begin{aligned} 0 &= X_{11}E - EX_{11}, & p_2EDE &= X_{21}E - DX_{11}, \\ p_1EDE &= X_{11}D - EX_{12}, & p_4EDD + p_3DDE &= X_{21}D - DX_{12}, \\ -(p_1+p_2)EDE &= X_{12}E - EX_{21}, & -p_3DDE &= X_{22}E - DX_{21}, \\ -p_4EDD &= X_{12}D - EX_{22}, & 0 &= X_{22}D - DX_{22}. \end{aligned} \tag{4.4.4.13}$$

Die durch (4.4.4.13) gegebene Algebra hat folgende eindimensionale Darstellung mit D, E und $X_{ij} \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} D &= 1 - E \quad , \\ X_{11} &= x \in \mathbb{R} \quad \text{freier Parameter} \quad , \\ X_{12} &= -\frac{(p_4+p_3-p_2)(E^2-E^3) + x(E-1)}{E} \quad , \\ X_{21} &= -\frac{p_2(E^2-E^3) + x(E-1)}{E} \quad , \\ X_{22} &= -\frac{(p_2-p_3)(E^2-2E^3+E^4) + x(1-2E+E^2)}{E} \quad , \\ p_1 &= -p_2 + p_4 + p_3 \quad . \end{aligned} \tag{4.4.4.14}$$

Hierbei ist $E \in]0,1[$ frei zu wählen und legt, wie unten gezeigt wird, die Teilchendichte fest. Die vier Gewichte p_i sind bis auf die Nebenbedingung $p_1 = -p_2 + p_4 + p_3$ frei wählbar. Diese Nebenbedingung schließt unter anderem den einfachen „random walk“($p_1 = p_2 = p_3 = p_4$) und den ASEP ($p_2 = p_4 = 0, p_1 = p_3$) mit ein.
Als Konsequenz dieser eindimensionalen Darstellung ergibt sich die stationäre Wahrscheinlichkeitsverteilung des Prozesses als einfaches Produktmaß (Mean-Field Lösung). Bei der Berechnung der folgenden Erwartungswerte beachte man stets, daß die Matrix D einem besetzten und die Matrix E einem unbesetzten Gitterplatz in einer beliebigen Teilchenkonfiguration entspricht (im Fall der eindimensionalen Darstellung sind E und D, wie bereits erwähnt lediglich reelle Zahlen). Die Teilchendichte ρ bestimmt sich damit aus:

$$\rho = \frac{\mathrm{Tr}[DC^{L-1}]}{\mathrm{Tr}[C^L]} \quad , \tag{4.4.4.15}$$

wobei C gegeben ist durch

$$C = E + D \quad .$$

Aus (4.4.4.15) folgt mit $C = E + D = 1$ für die Dichte $\rho = D$. Der Strom nach rechts ergibt sich hiermit einfach zu

$$f(\rho) = \rho \left\{ (p_1 - p_2)(1-\rho)^2 + (p_3 - p_4)\rho(1-\rho) \right\} \quad . \tag{4.4.4.16}$$

Die Clusterwahrscheinlichkeitsverteilung gewinnt man aus

$$C_n = \frac{\mathrm{Tr}[ED^nEC^{L-n-2}]}{\mathrm{Tr}[EDC^{L-2}]} \quad . \tag{4.4.4.17}$$

Bei der Berechnung des Nenners ist die Normierung der Clusterwahrscheinlichkeiten zu beachten. Im Fall der obigen eindimensionalen Darstellung folgt aus (4.4.4.17):

$$C_n = D^{n-1}E = \rho^{n-1}(1-\rho) \quad . \tag{4.4.4.18}$$

Darüber hinaus ist es möglich, eine zweidimensionale Darstellung der Algebra (4.4.4.13) zu finden. Mit Hilfe dieser ist man in der Lage, für eine weitere Nebenbedingung zwischen den Raten p_i (siehe (4.4.4.14)) exakte Angaben über den Prozeß machen zu können. Als Ansatz für die Darstellung wählt man [38]:

$$\begin{aligned} E^2 &= eE \quad , \\ D^2 &= dD \quad , \\ DED &= f(p_1, \ldots, p_4)edD \quad , \\ ED &\neq DE \quad . \end{aligned} \tag{4.4.4.19}$$

Die Struktur dieses Ansatzes ergibt sich generisch aus der sogenannten *2-Cluster-Approximation* [1] . Die Parameter e, d und $f(p_1, \ldots, p_4)$ sind reelle Zahlen. Der Ansatz läßt sich erfüllen durch zwei Matrizen E und D der Form:

$$E = \begin{pmatrix} e & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \qquad D = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{4.4.4.20}$$

(4.4.4.19) ist dann erfüllt, wenn man als Nebenbedingung für e und d wählt:

$$ed = \frac{1}{f(p_1, \ldots, p_4) - 1} \quad . \tag{4.4.4.21}$$

Wie sich leicht überprüfen läßt, sind die vier Matrizen E, D, ED und DE linear unabhängig. Infolge dessen scheint es plausibel, für die zweidimensionalen Matrizen X_{ij} folgenden Ansatz zu machen:

$$\begin{aligned} X_{11} &= aE \quad , \\ X_{22} &= bD \quad , \\ X_{12} &= cE + fD + gED + hDE \quad , \\ X_{21} &= iE + jD + kED + lDE \quad . \end{aligned} \tag{4.4.4.22}$$

Hierbei wurde bereits berücksichtigt, daß infolge der aus dem Cancelling Mechanismus stammenden Algebra (4.4.4.13) $[E, X_{11}] = [D, X_{22}] = 0$ gelten muß.

Mittels Computeralgebra erhält man dann für die Koeffizienten des sich aus (4.4.4.19) und (4.4.4.22) ergebenden linearen Gleichungssystems:

$$\begin{aligned}
&a = le, && h = 0,\\
&b = (p_2 - p_1)df(p_1, \dots, p_4) + ld, && i = p_2 df(p_1, \dots, p_4),\\
&c = -p_1 df(p_1, \dots, p_4), && j = 0,\\
&f = 0, && k = 0,\\
&g = l, && l \in \mathbb{R}, \quad \text{freier Parameter.}
\end{aligned} \tag{4.4.4.23}$$

Darüber hinaus bestehen folgende Relationen zwischen den Gewichten p_i und $f(p_1, \dots, p_4)$:

$$\begin{aligned}
p_1, p_2, p_3 &\in \mathbb{R} \quad , \quad \text{freie Parameter} \quad ,\\
f(p_1, \dots, p_4) &= \frac{p_3}{p_1} \quad ,\\
\frac{p_4}{p_2} &= \frac{p_3}{p_1} \quad .
\end{aligned} \tag{4.4.4.24}$$

Die Gewichte p_i sind also bis auf die Nebenbedingung $\frac{p_4}{p_2} = \frac{p_3}{p_1}$ frei wählbar. Ferner folgt mit (4.4.4.24) aus (4.4.4.21):

$$d = \frac{1}{e(\frac{p_3}{p_1} - 1)} \quad , \tag{4.4.4.25}$$

als Beziehung zwischen den bisher frei wählbaren Matrixeinträgen e und d.
Die Berechnung relevanter Meßgrößen gestaltet sich im Fall der zweidimensionalen Darstellung aufwendiger als im eindimensionalen Fall. Die Matrix C aus (4.4.4.15) hat nun folgende Gestalt:

$$C = \begin{pmatrix} e + d & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{4.4.4.26}$$

Diese Matrix hat die Eigenwerte

$$\lambda_\pm = \frac{e + \frac{1}{e(\frac{p_3}{p_1} - 1)}}{2} \pm \sqrt{\frac{(e + \frac{1}{e(\frac{p_3}{p_1} - 1)})^2}{4} + 1} \quad , \tag{4.4.4.27}$$

und die dazu gehörenden normierten Eigenvektoren

$$|v_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{\lambda_\pm^2}}}(1, \frac{1}{\lambda_\pm})^t \quad . \tag{4.4.4.28}$$

Im thermodynamischen Limes folgt dann für die Dichte:

$$\rho = \frac{\mathrm{Tr}[DC^{L-1}]}{\mathrm{Tr}[C^L]} \simeq \frac{1}{\lambda_+}\langle v_+|D|v_+\rangle = \frac{1 + \frac{1}{e(\frac{p_3}{p_1} - 1)}\lambda_+}{1 + \lambda_+^2} \quad . \tag{4.4.4.29}$$

Bei vorgegebener Dichte ρ ist dies eine implizite Bestimmungsgleichung für e, die sich numerisch lösen läßt. Für $\frac{p_3}{p_1} > 1$ erhält man aus (4.4.4.29) als Lösung $e \in \mathbb{R}$. Ist

jedoch $\frac{p_3}{p_1} < 1$, so ergibt sich $e \in \mathbb{C}$. Hierbei ist dann e rein imaginär. Sämtliche weiter unten aufgeführten Erwartungswerte bleiben jedoch reell. Alternativ kann man im Fall $\frac{p_3}{p_1} < 1$ durch einen modifizierten Ansatz für die Matrizen E und D das Auftreten komplexer Zahlen vermeiden. Diese Möglichkeit ist in Anhang D dokumentiert.
Der Strom berechnet sich aus:

$$f = \frac{\mathrm{Tr}[(p_1 - p_2)EDEC^{L-3} + p_3 DDEC^{L-3} - p_4 EDDC^{L-3}]}{\mathrm{Tr}[C^L]} \quad . \tag{4.4.4.30}$$

Im thermodynamischen Limes $L \to \infty$ läßt sich dies schreiben als:

$$f = \frac{\frac{1}{\lambda_+^3}}{1 + \frac{1}{\lambda_+^2}} \{(p_1 - p_2)(ed + 1)(e + \frac{1}{\lambda_+}) + p_3 d(e + \frac{1}{\lambda_+})(d + \frac{1}{\lambda_+}) - p_4 d(ed + 1)\} \quad , \tag{4.4.4.31}$$

mit d wie in (4.4.4.25). Aus (4.4.4.17) ergibt sich die Clusterwahrscheinlichkeitsverteilung zu:

$$C_n = \left(\frac{d}{\lambda_+}\right)^n \frac{e + \frac{1}{\lambda_+}}{d} \quad . \tag{4.4.4.32}$$

Hierbei ist e stets aufzufassen als $e = e(\rho)$.
Nachdem nun in den beiden letzten Kapiteln durch COMF und MPA verschiedene analytische Zugänge für das $4p$-Modell erarbeitet wurden, sollen die daraus resultierenden Ergebnisse mit aus Simulationen stammenden Ergebnissen verglichen werden.

4.5 Vergleich der Ergebnisse

Als erstes Beispiel wird eine repulsive Variante des symmetrischen $4p$-Modells betrachtet. Hierzu wird $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$ und $p_3 = p_4 = 0.8$ gewählt. Da bei diesem Modell der Strom stets verschwindet, dient hier lediglich die Clusterverteilung als Referenzgröße. Abb. 4.5 zeigt den Vergleich zwischen der Simulation und den analytischen Daten für ein System der Größe $L = 5000$ und der Dichte $\rho = 0.3$. Die Überein-

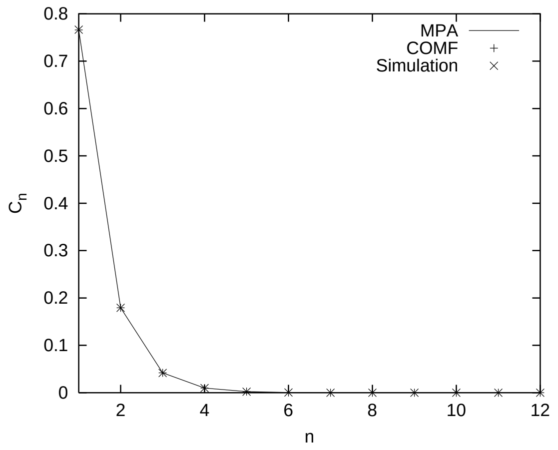


Abbildung 4.5: Clusterverteilungen, $\rho = 0.3$, $p_1 = p_2 = 0.5$, $p_3 = p_4 = 0.8$

stimmung aller drei Verteilungen ist exakt.
Als nächstes soll eine attraktive Variante des symmetrischen $4p$-Modells betrachtet werden, welche sich unter bestimmten Voraussetzungen als reduzierte Version des behandelten eindimensionalen Zellularautomaten interpretieren läßt. In Abb. 4.6 ist der Vergleich der Clusterverteilungen für dieselben Systemgrößen wie in Abb. 4.5 gezeigt, wobei jedoch nun $p_3 = p_4 = \frac{1}{5}$ gewählt wird. Auch hier ist, wie zu erwarten,

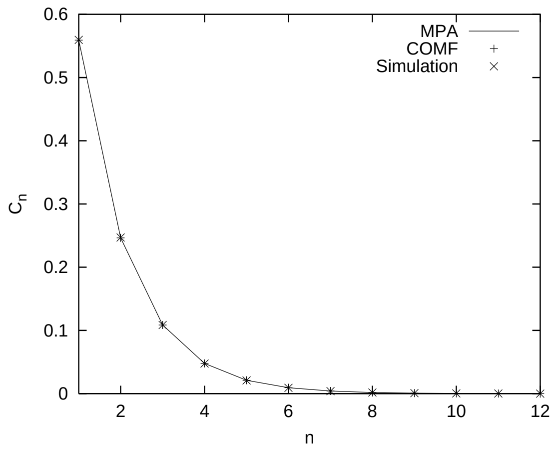


Abbildung 4.6: Clusterverteilung, $\rho = 0.3$, $p_1 = p_2 = 0.5$, $p_3 = p_4 = \frac{1}{5}$

die Übereinstimmung aller drei Verteilungen exakt. Obwohl die Wahrscheinlichkei-

ten für die Existenz großer Cluster hier höher ist als in Abb. 4.5, fallen auch bei der attraktiven Version die Verteilungen exponentiell ab. Offensichtlich existieren also keine langreichweitigen Korrelationen in diesem Modell.
Im folgenden sollen nun zwei total asymmetrische Versionen des Modells betrachtet werden, die es erlauben, Ströme zu messen. Hierfür wählt man zunächst $p_1 = \frac{1}{2}$ und setzt $p_2 = p_4 = 0$. Bei der repulsiven Variante wählt man schließlich $p_3 = 0.8$, während bei der attraktiven Variante stattdessen $p_3 = 0.2$ gesetzt wird. Wie sich aus (4.4.4.32) ergibt, haben die beiden Modelle die gleichen Clusterverteilungen wie die bereits diskutierten symmetrischen Modelle mit $p_1 = p_2$ und $p_3 = p_4$ zu denselben Werten von p_1 und p_3. Abb. 4.7 zeigt die Fundamentaldiagramme der beiden Modelle, jeweils berechnet durch Simulation, COMF und MPA. Die Übereinstimmung

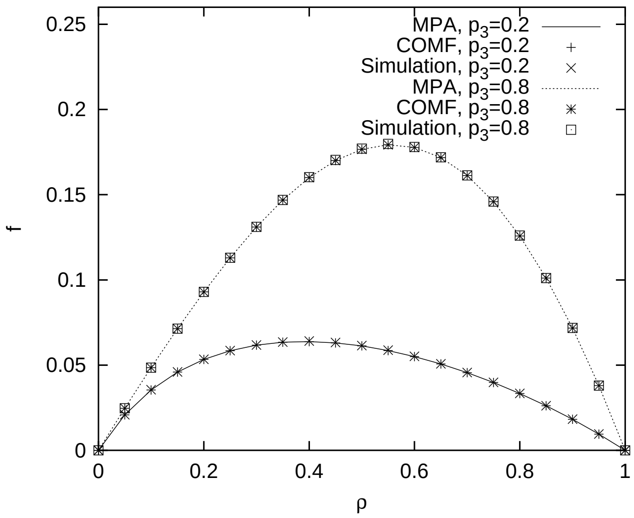


Abbildung 4.7: Fundamentaldiagramm, $p_1 = 0.5$, $p_2 = p_4 = 0$, attraktiv: $p_3 = 0.2$, repulsiv: $p_3 = 0.8$

zwischen den zu denselben Werten von p_3 gehörenden Kurven ist wiederum exakt. Der mittlere Teilchenfluß des attraktiven Modells ist deutlich geringer als der des repulsiven Modells. Die Strommaxima der beiden Modelle liegen bei unterschiedlichen Dichten.

Kapitel 5

Das Modell in zwei Dimensionen

Die zweidimensionale Version des Modells zur Aggregation auf dem Prinzip der lokalen Dichtewechselwirkung läßt sich in einem weitaus größeren Rahmen zur Beschreibung biologischer Aggregationsphänomene heranziehen, als die eindimensionale Version. Mögliche Interpretationen sind zum Beispiel das Verhalten einer Herde von Säugetieren oder die Bewegung von Bakterienkolonien auf einem Agar.
Eine Besonderheit der eindimensionalen Version ist die Unveränderlichkeit der ursprünglichen Reihenfolge der Teilchen auf dem Gitter. Die Teilchen können einander nicht überholen. Im zweidimensionalen Fall ergibt sich dagegen eine ganz andere Situation. Aufgrund der Quadratgitterstruktur mit vier nächsten Nachbarplätzen pro Gitterplatz ist es den Teilchen in einem weit höheren Maß möglich, sich zu durchmischen.
Ein weiterer interessanter Aspekt der zweidimensionalen Version ist, neben der Größe, die Struktur oder Form der auftretenden Cluster. Im eindimensionalen Fall gibt es nur eine mögliche Struktur für einen Cluster der Größe n: eine Kette aus n Teilchen. Im zweidimensionalen Fall gibt es hingegen eine Vielzahl möglicher Formen. Zum Beispiel treten in der Natur bei vergleichbaren Phänomenen neben kompakten, quaderförmigen Clustern auch zerfaserte, sich über größere räumliche Bereiche erstreckende Cluster auf. Auch kommt es häufig zu Spiral- und Musterbildungen. Daher wird es zunächst darum gehen, sich einen Eindruck über die durch das Modell gegebene räumliche Verteilung der Teilchen bei verschiedenen Dichten ρ und Sensitivitätsparametern k und die dabei auftretenden Clusterformen zu machen.

5.1 Visualisierung des Modells

Das im folgenden betrachtete System ist stets ein Quadratgitter der Größe $L^2 = 100 \times 100$. Es gelten periodische Randbedingungen. Abb. 5.1 zeigt zunächst das System für eine Teilchendichte von $\rho = 0.3$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Das heißt, die Teilchen sind zufällig auf das Gitter verteilt. Offensichtlich lassen sich keinerlei geordnete Strukturen erkennen.
In Abb. 5.2 ist nun das System für den kleinen Sensitivitätsparameter $k = 1$ im stationären Zustand nach 10 Millionen Updates dargestellt. Wie zu erwarten, kommt es zu keinerlei Ausbildung geordneter Strukturen, die Verteilung der Teilchen gleicht der zufälligen Verteilung in Abb. 5.1.

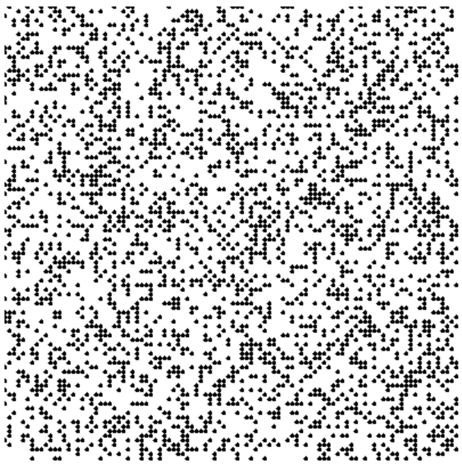


Abbildung 5.1: zufällige Anfangskonfiguration, $\rho = 0.3$

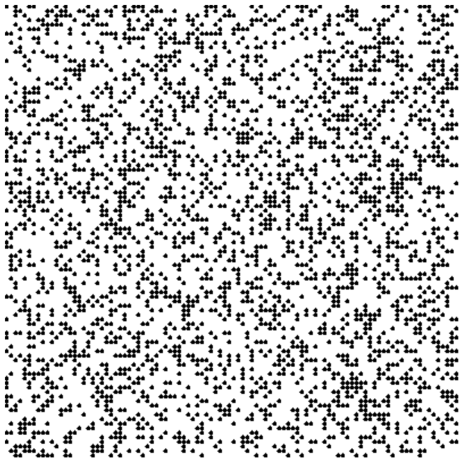


Abbildung 5.2: stationärer Zustand, $k = 1$, $\rho = 0.3$

Ein erheblich anderes Bild ergibt sich, wenn man den Parameter k erhöht. Abb. 5.3 zeigt das System zum gleichen Zeitpunkt wie in Abb. 5.2, jedoch für einen mittleren Parameter $k = 5$. Es läßt sich eine eindeutige Tendenz der Teilchen zur Clusterbildung erkennen. Es bilden sich viele große Cluster aus, an deren Rändern sich viele kleinere Cluster und einzelne Teilchen ansammeln.

Eine wiederum stark veränderte Situation erhält man, wenn man den Sensitivitätsparameter weiter erhöht. In Abb. 5.4 ist das System für den hohen Parameterwert $k = 10$ im stationären Zustand abgebildet, nach der gleichen Zahl von Updates wie in Abb. 5.2. Hier sind nun nahezu sämtliche Teilchen innerhalb großer Cluster gebunden. Es treten kaum noch einzelne Teilchen auf. Die Cluster haben größtenteils eine zerfaserte, nichtkompakte Form. Auch lassen sich Ansätze von Spiralbildungen erkennen.

Als nächstes soll nun noch der Einfluß der Dichte auf das System bei hohen Parameterwerten k untersucht werden. Abb. 5.5 zeigt das System für dieselben Voraussetzungen wie Abb. 5.4, jedoch für eine Dichte von $\rho = \frac{1}{2}$. Die Cluster sind im Mittel

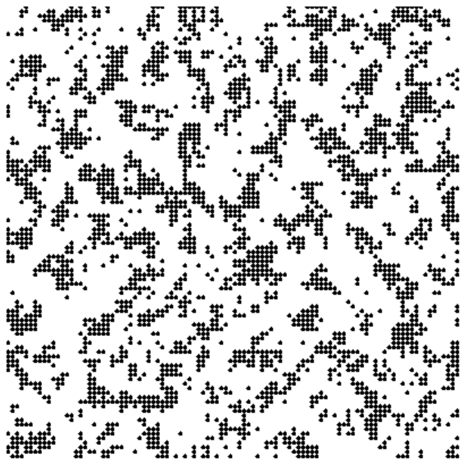


Abbildung 5.3: stationärer Zustand, $k = 5, \quad \rho = 0.3$

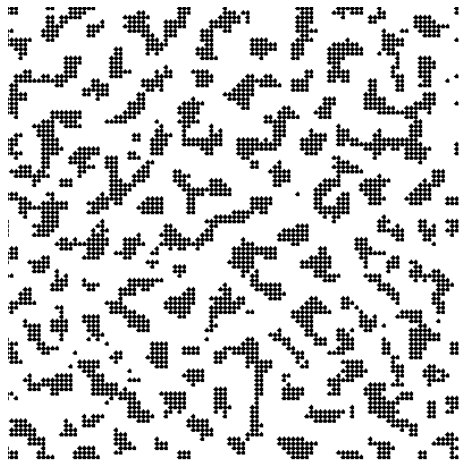


Abbildung 5.4: stationärer Zustand, $k = 10, \quad \rho = 0.3$

deutlich größer als bei $\rho = \frac{1}{2}$. Es existieren kaum noch einzelne Teilchen oder kleine Cluster.

Zum Abschluß ist in Abb. 5.6 das System für die Dichte $\rho = 0.7$ und $k = 10$ im stationären Zustand dargestellt. Hier existiert nun lediglich ein einziger makroskopischer Cluster, mit dem bis auf wenige Ausnahmen sämtliche Teilchen verbunden sind. Der Cluster ist jedoch nicht kompakt, sondern durchsetzt mit mehr oder weniger großen Bereichen der lokalen Teilchendichte $\rho \approx 0$. Um die Struktur der Cluster eingehender zu untersuchen, wäre es sehr interessant, ihre fraktale Dimension zu bestimmen.

Um quantitative Aussagen über die Clustergrößen machen zu können, sollen im nächsten Abschnitt die verschiedenen Clusterwahrscheinlichkeitsverteilungen miteinander verglichen werden. Dies läßt jedoch natürlich keine Aussagen über die spezielle Beschaffenheit der Cluster zu.

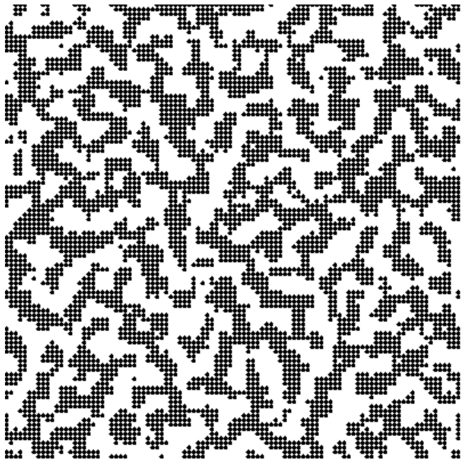


Abbildung 5.5: stationärer Zustand, $k = 10$, $\rho = \frac{1}{2}$

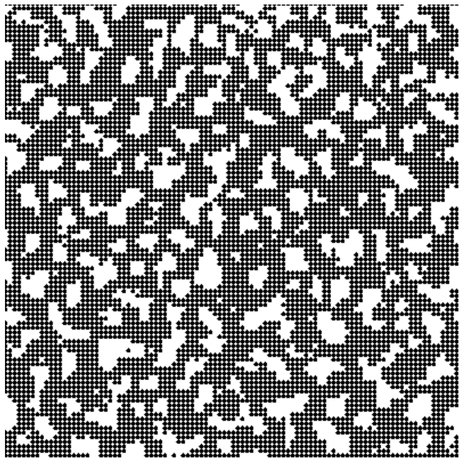


Abbildung 5.6: stationärer Zustand, $k = 10$, $\rho = 0.7$

5.2 Clustergrößenverteilungen des zweidimensionalen Modells

Als Cluster der Größe n bezeichnet man im zweidimensionalen Fall eine Ansammlung von n Teilchen, die folgende Bedingungen erfüllen:

- zwei besetzte nächste Nachbarplätze gehören zum selben Cluster,
- kein anderes Teilchen des Systems ist nächster Nachbar eines der n Teilchen des Clusters.

Zur Verdeutlichung zeigt Abb. 5.7 einen Cluster der Größe 21 und weitere kleinere Cluster. Die Messung der Clusterverteilungen gestaltet sich im zweidimensionalen Fall numerisch erheblich aufwendiger als im eindimensionalen Fall. Für die numerische Identifikation der Cluster wurde der Algorithmus von Hoshen-Kopelmann

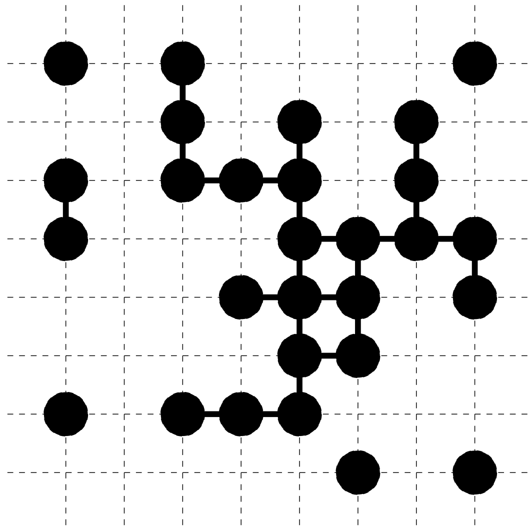


Abbildung 5.7: ein Cluster der Größe 21 und weitere kleinere Cluster; zu einem Cluster gehörende Teilchen sind durch durchgezogene Linien verbunden

verwendet [39]. Die Laufzeit der betreffenden Programme ist sehr lang. Daher lassen sich im zweidimensionalen Fall lediglich Systeme bis zur Größe $L^2 = 100 \times 100$ im Rahmen vertretbarer Rechenzeiten betrachten. Allerdings machen sich bei zu kleinen Systemen unter bestimmten Voraussetzungen erhebliche *finite-size-Effekte* bemerkbar, was im einzelnen noch diskutiert werden soll.
Abb. 5.8 zeigt nun für ein System der Größe $L^2 = 50 \times 50$ die Clusterverteilungen bei einem schwachen Sensitivitätsparameter von $k = 1$ für die Dichten $\rho = 0.3$, 0.4 und 0.5. Alle drei Verteilungen sind streng monoton fallend. Wie man in Abb.

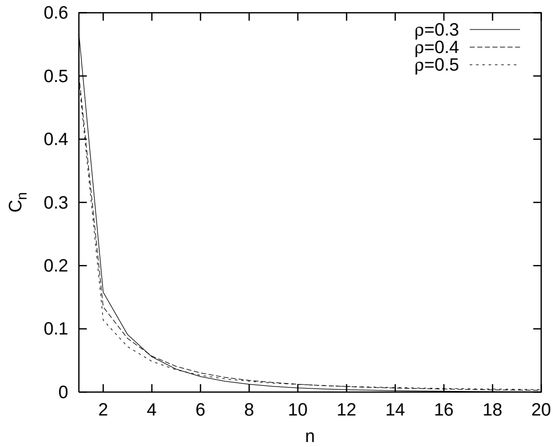


Abbildung 5.8: Clusterverteilungen; $\rho = 0.3$, 0.4, 0.5, $k = 1$

5.9 sieht, ergeben sich in einfach-logarithmischer Darstellung drei Geraden. Aus dem exponentiellen Abfall ist zu schließen, daß für kleine Parameterwerte k keine langreichweitigen Korrelationen zwischen den Clustern existieren. Wie sich darüber

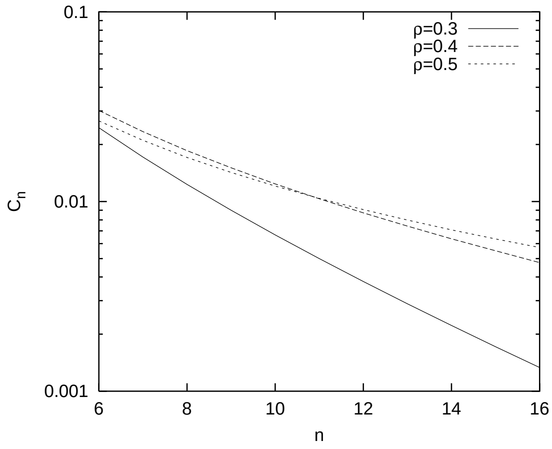


Abbildung 5.9: Clusterverteilungen, einfach-logarithmischer Auftrag ; $\rho = 0.3,\ 0.4,\ 0.5$, $k = 1$

hinaus prüfen läßt, machen sich für diesen Parameterwert k nur schwache finite-size-Effekte bemerkbar. Die Verteilungen für das System der Größe $L^2 = 50 \times 50$ aus Abb. 5.8 sind nahezu identisch mit Verteilungen eines Systems der Größe $L^2 = 100 \times 100$ zu den gleichen Parameterwerten. Daher ist es nicht nötig, die Verteilungen für das größere System explizit anzugeben.
Annähernd dasselbe Bild ergibt sich für den Parameter $k = 5$. In Abb. 5.10 sind die Verteilungen für diesen Parameter und dieselben Dichten wie in Abb. 5.8 aufgetragen. Auch hier fallen alle drei Verteilungen streng monoton ab, die Wechselwirkung

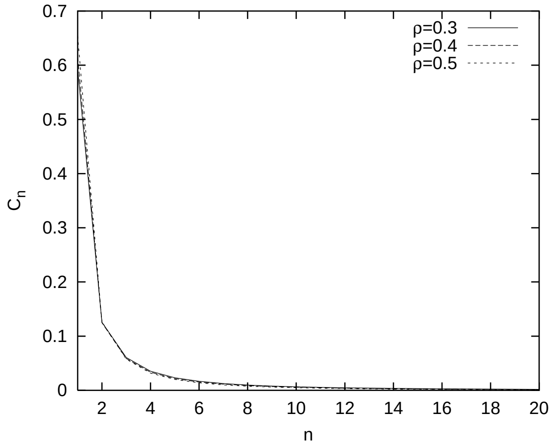


Abbildung 5.10: Clusterverteilungen; $\rho = 0.3,\ 0.4,\ 0.5$, $k = 5$

zwischen den Teilchen ist auch bei diesem Parameterwert noch sehr gering.
Ein völlig anderes Bild ergibt sich für den hohen Sensitivitätsparameterwert $k = 10$. In Abb. 5.11 sind hierfür die Clusterverteilungen eines Systems der Größe $L^2 = 50 \times 50$ und eines Systems der Größe $L^2 = 100 \times 100$ für die Dichte $\rho = 0.3$ dargestellt. Um den Verlauf der Verteilungen deutlicher zu machen, ist hier die y-Achse

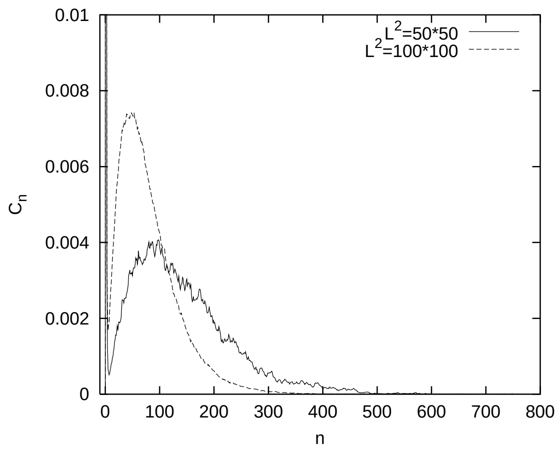


Abbildung 5.11: Clusterverteilungen für verschiedene Systemgrößen; $\rho = 0.3$, $k = 10$

des Graphen nur bis zum Wert 0.1 abgebildet. Die expliziten Werte der Wahrscheinlichkeiten C_1 und C_2 für die beiden Systeme, die sich aus Abb. 5.11 nicht ablesen lassen, sind in der folgenden Tabelle angegeben:

	$L^2 = 50 \times 50$	$L^2 = 100 \times 100$
C_1	0.26	0.20
C_2	0.19	0.16

Beide Verteilungen haben ihr Maximum bei der Clustergröße eins, weichen jedoch darüber hinaus in erheblichem Maß von einander ab. Die Verteilung des größeren Systems zeichnet sich durch ein relativ scharfes lokales Maximum im Bereich der Clustergrößen 50 bis 60 aus. Die Verteilung des Systems der Größe $L^2 = 50 \times 50$ hingegen ist wesentlich breiter und zu höheren Clustergrößen verschoben.

Ein weiterer Unterschied zwischen den Verteilungen ergibt sich, wenn man den Bereich der Clustergrößen von 700 bis 800 näher betrachtet (Abb. 5.12). Hierbei ist zu beachten, daß das System der Größe $L^2 = 50 \times 50$ bei einer Dichte von $\rho = 0.3$ genau 750 Teilchen enthält. Wie in Abb. 5.12 zu sehen, besitzt dieses System ein lokales Maximum bei der Clustergröße $n = 749$. Dieses Maximum hat zwar einen geringen Wert, im Vergleich zum Wert des globalen Maximums bei $n = 1$, ist jedoch signifikant. Es treten also in dem System der Größe $L^2 = 50 \times 50$ mit nichtverschwindender Wahrscheinlichkeit Cluster von der Größe der Teilchenzahl auf. Die Verteilung des größeren Systems weist hingegen kein solches Maximum auf. Obwohl dieses System 3000 Teilchen enthält, ist die Wahrscheinlichkeit in diesem System Cluster größer als $n = 600$ zu finden, annähernd gleich null.

Untersucht man nun bei gleichbleibendem Sensitivitätsparameter von $k = 10$ Systeme der Größe $L^2 = 50 \times 50$ für steigende Dichten, so verändern sich die Clusterverteilungen in erheblicher Weise. Abb. 5.13 zeigt die Verteilung bei einer Dichte von $\rho = 0.5$. Hierbei wurde die x-Achse im Bereich von $n = 20$ bis $n = 1200$ nicht abgebildet, da hier stets $C_n \approx 0$ gilt. Wie man in Abb. 5.13 sieht, existieren überhaupt keine Cluster mittlerer Größe mehr in dem System. Neben einzelnen Teilchen und Clustern sehr kleiner Größe gibt es nur noch makroskopische Cluster

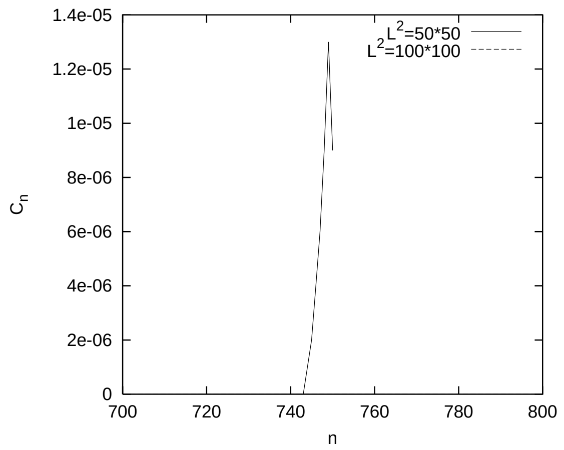


Abbildung 5.12: Clusterverteilungen für die selben Systeme wie in Abb. 5.11; $\rho = 0.3$, $k = 10$

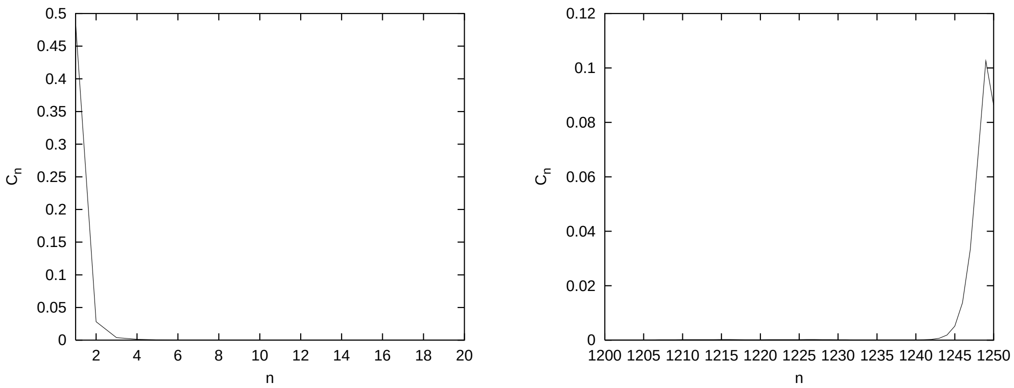


Abbildung 5.13: Clusterverteilung, $k = 10$, $\rho = 0.5$; x-Achse teilweise nicht abgebildet, $L^2 = 50 \times 50$

in dem System, die annähernd die gesamte Teilchenzahl umfassen. Diese Verteilung ist ein Indiz für eine mögliche Phasenseparation, die durch die Systemdichte bei großem Parameter k kontrolliert wird. Hierbei entspricht die eine Phase dem System bei geringeren Dichten (siehe Abb. 5.11), in der alle Cluster kleiner und mittlerer Größe mit nichtverschwindender Wahrscheinlichkeit auftreten. Die zweite Phase, bei hohen Dichten, enthält neben sehr kleinen Clustern nur noch Cluster, die annähernd alle Teilchen des Systems umfassen. Möglicherweise ist die Verteilung des Systems der Größe $L^2 = 100 \times 100$ in Abb. 5.11 auch die Folge eines *finite-time-effekts*. Das System könnte sich noch nicht im stationären Zustand befinden. Um genauere Aussagen über die Art der möglichen Phasenseparation zu machen, sind jedoch weitgreifendere numerische Untersuchungen notwendig, die den Rahmen dieser Diplomarbeit überschreiten. Vor allem ist eine genaue finite-size Analyse anhand größerer Systeme erforderlich, um verläßliche Aussagen über das Verhalten des Systems im thermodynamischen Limes machen zu können. Auch bietet es sich an, größere Gleichgewichtseinstellzeiten für größere Systeme zu betrachten. Es ist allerdings zu erwarten, daß die Zeit, die die Systeme benötigen, um in den stationären

Zustand zu gelangen, mit der Systemgröße erheblich anwächst.

Abschließend sollen im nächsten Abschnitt Dichte-Dichte-Korrelationsfunktionen des zweidimensionalen Systems betrachtet werden.

5.3 Dichte-Dichte-Korrelationsfunktionen

Es wurden Dichte-Dichte-Korrelationen in verschiedenen räumlichen Richtungen des Gitters untersucht. Sei zunächst $n_{i,j}$ die Observable, die die Besetzungszahl am Ort (i,j) eines zweidimensionalen Quadratgitters mißt, das heißt:

$$n_{x,y} := \begin{cases} 0 & \text{Platz } (i,j) \text{ unbesetzt,} \\ 1 & \text{Platz } (i,j) \text{ besetzt .} \end{cases}$$

Mit dieser Notation ergeben sich die Korrelationsfunktionen in x-, y- und Diagonalrichtung als folgende Erwartungswerte:

$$\begin{aligned} G^x(r) &:= \langle n_{i,j} n_{i+r,j} \rangle - \langle n_{i,j} \rangle \langle n_{i+r,j} \rangle, \\ G^y(r) &:= \langle n_{i,j} n_{i,j+r} \rangle - \langle n_{i,j} \rangle \langle n_{i,j+r} \rangle, \\ G^d(r) &:= \langle n_{i,j} n_{i+r,j+r} \rangle - \langle n_{i,j} \rangle \langle n_{i+r,j+r} \rangle, \end{aligned} \tag{5.3.5.1}$$

mit:

$$r \in \{0, 1, 2, \dots, \frac{L}{2}\}.$$

Hierbei ist stets über alle Plätze (i,j) zu mitteln. Der Erwartungswert $\langle n_{i,j} \rangle \langle n_{l,m} \rangle$ ist natürlich stets identisch mit ρ^2. Die Korrelationsfunktionen in Diagonalrichtung lassen sich darüber hinaus bezüglich der beiden Hauptdiagonalrichtungen unterscheiden.

Anhand numerischer Untersuchungen läßt sich feststellen, daß in diesem System sämtliche Korrelationsfunktionen räumlich isotrop sind[1]. Daher genügt es, die Korrelationsfunktionen in einer Diagonalrichtung zu betrachten. Die Funktionen seien ab nun einheitlich mit $G(r)$ bezeichnet. Abb. 5.14 zeigt für ein System der Größe $L^2 = 50 \times 50$ bei einer Dichte von $\rho = 0.4$ den Vergleich zwischen den Sensitivitätsparametern $k = 1$ und $k = 10$. Wie man sich leicht überlegt, muß stets $G(0) = \rho - \rho^2$ gelten. Wie aus Abb. 5.14 zu sehen ist, gibt es für $k = 1$ nur sehr kurzreichweitige Korrelationen zwischen den Teilchen. Für $n > 3$ ist $G(r)$ praktisch konstant gleich null. Für $k = 10$ hingegen besitzt $G(r)$ ein globales Minimum bei dem Abstand $r = 8$. Das Minimum könnte im Zusammenhang mit der Tendenz der Teilchen zur Ausbildung von nichtkompakten Clustern stehen. Um den genauen Grund für die Existenz dieses Minimums anzugeben, muß das zweidimensionale System jedoch viel genauer untersucht werden. Darüber hinaus läßt sich festhalten, daß es bei diesem k langreichweitige Korrelationen zwischen den Teilchen zu geben scheint.

[1] Hierbei ist zu beachten, daß in der Diagonalrichtung die Gitterkonstante um den Faktor $\sqrt{2}$ größer ist

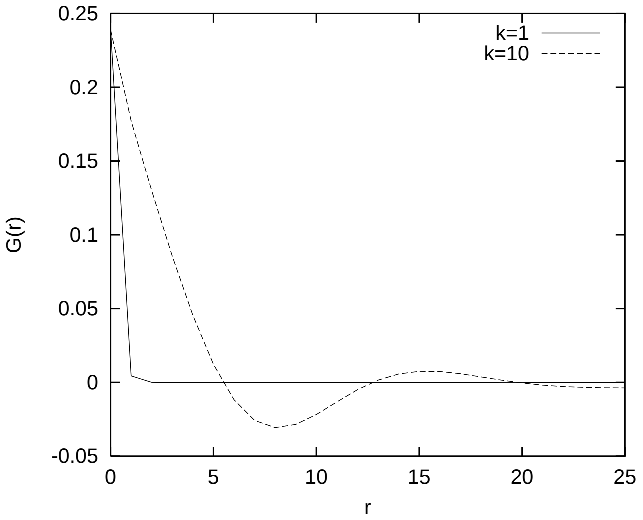


Abbildung 5.14: Dichte-Dichte-Korrelationsfunktionen; $\rho = 0.4$, $k = 1$ und $k = 10$

Wie weitere numerische Untersuchungen zeigen, hat die Dichte bei hohem Parameterwert k keinen allzu starken Einfluß auf den Verlauf der Korrelationsfunktionen.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde der Versuch unternommen, einfache biologische Bewegungsphänomene mit Hilfe von Zellularautomatenmodellen darzustellen. Die Zellularautomatenmodelle zeichnen sich durch ihre einfachen Regelsätze und durch ihre Eignung für Computersimulationen sowie analytische Untersuchungen aus. In den letzten Jahren sind daher oben genannte und ähnliche biologische Phänomene mittels Zellularautomaten untersucht worden (siehe Einleitung). Diese Zellularautomaten sind zwar in der Lage die zugrundeliegenden Phänomene sehr gut zu beschreiben, jedoch besitzen sie zum Teil recht komplizierte und unrealistische Update-Regeln.

Der in dieser Arbeit untersuchte Zellularautomat zur Schwarm- und Aggregationsbildung zeichnet sich hingegen durch ein einfaches Regelwerk aus. Er basiert auf dem Prinzip der lokalen Dichtewechselwirkung zwischen den Teilchen. Die Teilchen bewegen sich bevorzugt in Richtung höherer Dichten. Die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Teilchen wird durch den sogenannten Sensitivitätsparameter k kontrolliert, der als inverse Temperatur zu interpretieren ist. Die expliziten Regeln des Modells sind in Kapitel 2 dargestellt.

Kapitel 3 beschäftigt sich eingehend mit der eindimensionalen Version des Zellularautomaten. Das natürliche Maß zur Untersuchung des Aggregationsverhaltens der betrachteten Systeme ist die Clustergrößenverteilung. Diese wird für unterschiedliche Werte der Dichte ρ und des Sensitivitätsparameters k im stationären Zustand der Systeme ausführlich diskutiert. Es zeigt sich, daß für beliebige Dichten die Tendenz zur Clusterbildung mit wachsendem Parameter k stark zunimmt. Dabei kommt es jedoch nicht zur Ausbildung makroskopischer Cluster. Im Bereich kleiner Parameter k fallen die Verteilungen rein exponentiell ab. Für große Werte von k besitzen die Verteilungen stets ein lokales Maximum bei einer mittleren Clustergröße, um anschließend ebenfalls exponentiell abzufallen.
Mit Hilfe der COMF Theorie, eines analytischen Näherungsverfahrens, ist man in der Lage die Clusterverteilungen für kleine Parameterwerte k sehr gut zu beschreiben. Die mittels COMF errechneten Clusterverteilungen stimmen jedoch für größere k nicht mehr mit den aus den Messungen stammenden Verteilungen überein. Der Grund hierfür sind längerreichweitige Korrelationen zwischen den Teilchen, die durch

COMF nicht berücksichtigt werden.
Anschließend werden drei Modifikationen des ursprünglichen eindimensionalen Modells untersucht. Zunächst wird der Limes $k \to \infty$ betrachtet. Dieser Limes hat zur Folge, daß die Teilchenbewegung deterministisch wird. Es kommt hierbei schließlich zu sogenannten eingefrorenen Endkonfigurationen, bei denen sämtliche Teilchen inaktiv sind. In den Clusterverteilungen dieser Endkonfigurationen existieren keine Cluster der Größe eins mehr. Sie besitzen ein ausgeprägtes Maximum bei einer mittleren Clustergröße und fallen für größere Cluster exponentiell ab. Für kleine Systeme bis zur Größe $L = 32$ ist man in der Lage die auftretenden Clusterverteilungen mittels einfacher stochastischer Überlegungen vorherzusagen.
In der zweiten Modifikation des Modells wird die Wechselwirkungsreichweite der Teilchen von reiner nächster Nachbarwechselwirkung auf weitere Nachbarplätze ausgedehnt. Dies führt zur teilweisen Ausbildung größerer Cluster, liefert aber darüber hinaus keine weiteren qualitativen Änderungen des Systemverhaltens.
Schließlich wird eine Bewegungsvorzugsrichtung in das Modell implimentiert. Diese Vorzugsrichtung könnnte etwa durch das Anlegen eines externen Feldes zustandegekommen sein. Die Stärke der Teilchendrift wird durch den neuen Parameter w gesteuert. Zentrale Meßgröße für die Stärke der Teilchenbewegung ist der sogennante Teilchenstrom oder Teilchenfluß f. Dieser Teilchenfluß wird für verschiedene Parameterwerte w und k im Fundamentaldiagramm gegen die Dichte aufgetragen. Hierbei wird der Teilchenstrom durch wachsendes w erhöht und durch wachsendes k erniedrigt. Darüber hinaus werden für mehrere Dichten bei verschiedenen Werten von w und k die Clusterverteilungen gemessen. Diese Verteilungen ähneln denen des ursprünglichen Modells, mit der zusätzlichen Eigenschaft, daß durch Erhöhung von w die Tendenz zur Clusterbildung unterdrückt wird. Sowohl der Teilchenfluß, als auch die Clusterverteilungen lassen sich mit Hilfe von COMF beschreiben. Jedoch weichen die mittels COMF errechneten Daten für größeres k erheblich von den gemessenen Daten ab.

In Kapitel 4 wird mit dem sogenannten $4p$-Modell ein neues Modell zur Beschreibung von eindimensionalen Transport- und Diffusionsphänomenen eingeführt. Die Regeln dieses Zellularautomaten sind sehr einfach, die lokale Wechselwirkungsreichweite des Prozesses beträgt 3 Plätze. Unter gewissen Voraussetzungen läßt es sich als eine Minimalversion des in Kapitel 3 diskutierten eindimensionalen Modells interpretieren. Aufgrund seiner einfachen Struktur ist das Modell sehr gut für analytische Untersuchungen geeignet. Zunächst lassen sich wieder durch COMF errechnete Teilchenströme und Clusterverteilungen bestimmen. Darüber hinaus ist man jedoch unter bestimmten Voraussetzungen in der Lage, mit Hilfe der Matrix-Produkt-Ansatz-Technik exakte Angaben über die quantitativen Meßgrößen des Systems machen zu können. Die aus COMF und MPA ermittelten Werte stimmen sowohl für die Clusterverteilungen als auch für die Fundamentaldiagramme mit den Werten aus den Simulationen überein. Die Clusterverteilungen sind stets rein exponentiell abfallend.

Schließlich wird in Kapitel 5 die zweidimensionale Version des in Kapitel 2 eingeführten Zellularautomaten untersucht. Das Verhalten des zweidimensionalen Modells ist um einiges vielschichtiger und interessanter, als das Verhalten des eindimensionalen

Modells. Die sich bildenden Cluster sind nicht mehr kompakt, es kommt zu Spiral- und Lochbildung. Dieses Bild läßt sich durch numerische Untersuchung der Clusterverteilungen und Dichte-Dichte-Korrelationsfunktionen erhärten. Bei der Messung der Clustergrößenverteilungen machen sich erhebliche finite-size-Effekte bemerkbar. Für bestimmte Systemgrößen und Parameterwerte lassen sich makroskopische Cluster erzeugen. Möglicherweise gibt es einen durch die Systemdichte ρ gesteuerten Phasenübergang bei hohen Werten des Sensitivitätsparameters k. Um das Verhalten des zweidimensionalen Modells jedoch eingehender zu verstehen, sind numerische Untersuchungen von erheblich höherem Aufwand notwendig. Hier lassen sich in zukünftigen Arbeiten sicherlich noch einige interessante Fragestellungen untersuchen. Darüber hinaus wäre es von Interesse, die zweidimensionale Version mit Problemen aus der Perkolationstheorie in Verbindung zu bringen.

Abschließend läßt sich sagen, daß in dieser Arbeit eine Reihe interessanter Ergebnisse erzielt wurden. Es wurden einige Methoden der statistischen Physik erfolgreich auf Probleme mit biologisch motivierten Fragestellungen angewendet. Hier ist besonders die Erweiterung der Anwendbarkeit des COMF-Verfahrens auf Modelle mit zufällig-sequentiellem Update zu nennen[1]. Leider gibt es bisher keine Möglichkeit, die Ergebnisse mit realen Meßdaten aus biologischen Experimenten zu vergleichen. Gerade im Bereich der eindimensionalen Diffusion sollten sich jedoch einige Vergleichsmöglichkeiten finden lassen. Dies wäre ein Hauptaugenmerk für zukünftige Untersuchungen.
Der in Kapitel 2 eingeführte Zellularautomat eignet sich aufgrund seiner Struktur eher zur Beschreibung von reinen Aggregationsphänomenen, als zur Beschreibung von Schwarmbildungen, da die in einem Cluster gebundenen Teilchen keine Bewegungen mehr vollziehen. Zur Beschreibung von Schwarmbildung wäre es erforderlich, die Regeln des Automaten in geeigneter Weise abzuwandeln, um orientierungsabhängige lokale Wechselwirkung zwischen den Teilchen zu implimentieren. Dies würde zwingend die Einführung permanenter Geschwindigkeitsvektoren für die Teilchen erforderlich machen, um dauerhafte Teilchenbewegung zu gewährleisten.
Anschließend wäre es sehr interessant, das auf dichteabhängiger Wechselwirkung basierende Modell mit dem neuen auf orientierungsabhängiger Wechselwirkung beruhenden Modell zu kombinieren, um auf diese Weise das typische Verhalten bestimmter Mikroorganismen in ihren Lebenszyklen zu beschreiben.
Schließlich könnte man noch unterschiedliche Teilchensorten mit wechselseitiger Anziehung oder Abstoßung in das Modell einfügen, um zum Beispiel Musterbildung zu beschreiben. Auch ist die strikte Teilchenzahlerhaltung kein zwingendes Erfordernis der Modelle. Läßt man sie fallen, so könnten sich die Modelle zur Beschreibung von Wachstumsprozessen eignen.

[1] Im Bereich der Verkehrsphysik wurde COMF bisher ausschließlich auf Modelle mit parallelem Update angewendet

Kapitel 7

Anhang

A Zur Herleitung der COMF-Gleichungen in 3.3

Zur Herleitungen der COMF-Gleichungen für den stationären Zustand seien zunächst die lokalen Übergangswahrscheinlichkeiten wie folgt abgekürzt:

$$p_1 := \frac{1}{2}, \qquad p_2 := \frac{\exp(\frac{1}{2}k)}{1+\exp(\frac{1}{2}k)}, \qquad p_3 := \frac{\exp(\frac{1}{2}k)}{2+\exp(\frac{1}{2}k)}, \qquad p_4 := \frac{\exp(\frac{1}{2}k)}{1+2\exp(\frac{1}{2}k)},$$
$$p_5 := \frac{1}{2+\exp(\frac{1}{2}k)}, \qquad p_6 := \frac{1}{3}, \qquad p_7 := \frac{1}{1+2\exp(\frac{1}{2}k)}, \qquad p_8 := \frac{1}{1+\exp(\frac{1}{2}k)}. \tag{A.7.1}$$

Es ergeben sich hiermit die Wahrscheinlichkeiten $P_{t+\frac{1}{N}}(j)$ (zufällig sequentieller Update) aus den Wahrscheinlichkeiten $P_t(j)$ wie folgt:

$$\begin{aligned} P_{t+\frac{1}{N}}(0) \;&=\; \frac{2}{N}P_t(0)\underbrace{\{P_t(0)+p_1P_t(1)+p_2(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:c_1} \\ &+\frac{2}{N}P_t(1)\underbrace{\{p_1P_t(0)+p_4P_t(1)+p_3(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:c_2} \\ &+\frac{N-2}{N}P_t(0) \quad , \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
P_{t+\frac{1}{N}}(1) &= \frac{2}{N}P_t(1)\underbrace{\{p_1P_t(0)+p_7P_t(1)+p_5(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:c_3}\\
&\quad+\frac{2}{N}P_t(0)\underbrace{\{p_1P_t(1)+p_8(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{:=c_4}\\
&\quad+\frac{2}{N}P_t(2)\underbrace{\{p_8P_t(0)+p_5P_t(1)+p_6(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:c_5}\\
&\quad+\frac{N-2}{N}P_t(1)\quad,\\
P_{t+\frac{1}{N}}(2) &= \frac{2}{N}P_t(2)\underbrace{\{p_2P_t(0)+p_5P_t(1)+p_6(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:c_6}\\
&\quad+\frac{2}{N}P_t(1)\underbrace{\{p_4P_t(1)+p_5(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:c_7}\\
&\quad+\frac{2}{N}P_t(3)\{p_8P_t(0)+p_5P_t(1)+p_6(1-P_t(0)-P_t(1))\}\\
&\quad+\frac{N-2}{N}P_t(2)\quad,\\
P_{t+\frac{1}{N}}(j) &= \frac{2}{N}P_t(j)\{p_2P_t(0)+p_5P_t(1)+p_6(1-P_t(0)-P_t(1))\}\\
&\quad+\frac{2}{N}P_t(j-1)\underbrace{\{p_3P_t(1)+p_6(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:c_8}\\
&\quad+\frac{2}{N}P_t(j+1)\{p_8P_t(0)+p_5P_t(1)+p_6(1-P_t(0)-P_t(1))\}\\
&\quad+\frac{N-2}{N}P_t(j)\quad,\qquad\forall_{j>2}\quad.
\end{aligned}
\tag{A.7.2}
$$

B Zur Herleitung der COMF-Gleichungen in 3.6.5

Die lokalen Übergangswahrscheinlichkeiten des eindimensionalen asymmetrischen Modells seien wie folgt abgekürzt:

$$
\begin{aligned}
p_1 &:= \frac{1}{1+\frac{1}{w}+w}, & p_2 &:= \frac{\frac{1}{w}}{1+\frac{1}{w}+w},\\
p_3 &:= \frac{w}{1+\frac{1}{w}+w}, & p_4 &:= \frac{1}{1+w+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)},\\
p_5 &:= \frac{\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)}{1+w+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)}, & p_6 &:= \frac{w}{1+w+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)},\\
p_7 &:= \frac{1}{1+\frac{1}{w}+w\exp(\frac{1}{2}k)}, & p_8 &:= \frac{\frac{1}{w}}{1+\frac{1}{w}+w\exp(\frac{1}{2}k)},\\
p_9 &:= \frac{w\exp(\frac{1}{2}k)}{1+\frac{1}{w}+w\exp(\frac{1}{2}k)}, & p_{10} &:= \frac{1}{1+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)+w\exp(\frac{1}{2}k)},\\
p_{11} &:= \frac{\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)}{1+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)+w\exp(\frac{1}{2}k)}, & p_{12} &:= \frac{w\exp(\frac{1}{2}k)}{1+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)+w\exp(\frac{1}{2}k)},\\
p_{13} &:= \frac{\exp(\frac{1}{2}k)}{\exp(\frac{1}{2}k)+w}, & p_{14} &:= \frac{w}{\exp(\frac{1}{2}k)+w},\\
p_{15} &:= \frac{\exp(\frac{1}{2}k)}{\exp(\frac{1}{2}k)+w\exp(\frac{1}{2}k)}, & p_{16} &:= \frac{w\exp(\frac{1}{2}k)}{\exp(\frac{1}{2}k)+w\exp(\frac{1}{2}k)},\\
p_{17} &:= \frac{\exp(\frac{1}{2}k)}{\exp(\frac{1}{2}k)+\frac{1}{w}}, & p_{18} &:= \frac{\frac{1}{w}}{\exp(\frac{1}{2}k)+\frac{1}{w}},\\
p_{19} &:= \frac{\exp(\frac{1}{2}k)}{\exp(\frac{1}{2}k)+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)}, & p_{20} &:= \frac{\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)}{\exp(\frac{1}{2}k)+\frac{1}{w}\exp(\frac{1}{2}k)}.
\end{aligned}
\tag{B.7.1}
$$

Hiermit ergeben sich die Wahrscheinlichkeiten $P_{t+\frac{1}{N}}(j)$ aus den Wahrscheinlichkeiten $P_t(j)$ zu:

$$
\begin{aligned}
P_{t+\frac{1}{N}}(0) \;=\;& \frac{1}{N}P_t(0)\underbrace{\{2P_t(0)+(p_{15}+p_{19})P_t(1)+(p_{17}+p_{13})(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:\tilde{c}_1}\\
&+\frac{1}{N}P_t(1)\underbrace{\{(p_{16}+p_{20})P_t(0)+(p_{11}+p_{12})P_t(1)+(p_9+p_5)(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:\tilde{c}_2}\\
&+\frac{N-2}{N}P_t(0) \quad ,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P_{t+\frac{1}{N}}(1) &= \frac{1}{N}P_t(1)\underbrace{\{(p_{15}+p_{19})P_t(0)+2p_{10}P_t(1)+(p_7+p_4)(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:\tilde{c}_3} \\
&+\frac{1}{N}P_t(0)\underbrace{\{(p_{16}+p_{20})P_t(1)+(p_{14}+p_{18})(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{:=\tilde{c}_4} \\
&+\frac{1}{N}P_t(2)\underbrace{\{(p_{14}+p_{18})P_t(0)+(p_6+p_8)P_t(1)+(p_2+p_3)(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:\tilde{c}_5} \\
&+\frac{N-2}{N}P_t(1) \quad , \\
P_{t+\frac{1}{N}}(2) &= \frac{1}{N}P_t(2)\underbrace{\{(p_{13}+p_{17})P_t(0)+(p_4+p_7)P_t(1)+2p_1(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:\tilde{c}_6} \\
&+\frac{1}{N}P_t(1)\underbrace{\{(p_{11}+p_{12})P_t(1)+(p_6+p_8)(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:\tilde{c}_7} \\
&+\frac{1}{N}P_t(3)\{(p_{14}+p_{18})P_t(0)+(p_6+p_8)P_t(1)+(p_2+p_3)(1-P_t(0)-P_t(1))\} \\
&+\frac{N-2}{N}P_t(2) \quad , \\
P_{t+\frac{1}{N}}(j) &= \frac{1}{N}P_t(j)\{(p_{13}+p_{17})P_t(0)+(p_7+p_4)P_t(1)+2p_1(1-P_t(0)-P_t(1))\} \\
&+\frac{1}{N}P_t(j-1)\underbrace{\{(p_5+p_9)P_t(1)+(p_2+p_3)(1-P_t(0)-P_t(1))\}}_{=:\tilde{c}_8} \\
&+\frac{1}{N}P_t(j+1)\{(p_{14}+p_{18})P_t(0)+(p_6+p_8)P_t(1)+(p_2+p_3)(1-P_t(0)-P_t(1))\} \\
&+\frac{N-2}{N}P_t(j) \quad , \qquad \forall_{j>2} \quad .
\end{aligned}
\tag{B.7.2}
$$

C Zur Herleitung der COMF-Gleichungen in 4.3

Die lokalen Übergangswahrscheinlichkeiten sind durch die Definition des 4p-Modells in 4.1 gegeben. Hieraus folgen die Wahrscheinlichkeiten $P_{t+\frac{1}{N}}(j)$ aus den Wahrscheinlichkeiten $P_t(j)$ in folgender Weise:

$$\begin{aligned}
P_{t+\frac{1}{N}}(0) &= \frac{1}{N}P_t(0)\underbrace{\{2P_t(0)+((1-p_4)+(1-p_3))(1-P_t(0))\}}_{=:a_1}\\
&+\frac{1}{N}P_t(1)\underbrace{\{(p_3+p_4)P_t(0)+(p_1+p_2)(1-P_t(0))\}}_{=:a_2}\\
&+\frac{N-2}{N}P_t(0) \quad ,\\
P_{t+\frac{1}{N}}(1) &= \frac{1}{N}P_t(1)\underbrace{\{((1-p_3)+(1-p_4))P_t(0)+2(1-(p_1+p_2))(1-P_t(0))\}}_{=:a_3}\\
&+\frac{1}{N}P_t(0)\underbrace{\{(p_3+p_4)(1-P_t(0))\}}_{:=a_4}\\
&+\frac{1}{N}P_t(2)\{(p_3+p_4)P_t(0)+(p_1+p_2)(1-P_t(0))\}\\
&+\frac{N-2}{N}P_t(1) \quad ,\\
P_{t+\frac{1}{N}}(j) &= \frac{1}{N}P_t(j)\{((1-p_4)+(1-p_3))P_t(0)+2(1-(p_1+p_2))(1-P_t(0)-P_t(1))\}\\
&+\frac{1}{N}P_t(j-1)\underbrace{\{(p_1+p_2)(1-P_t(0))\}}_{=:a_5}\\
&+\frac{1}{N}P_t(j+1)\{(p_3+p_4)P_t(0)+(p_1+p_2)(1-P_t(0))\}\\
&+\frac{N-2}{N}P_t(j) \quad , \qquad \forall_{j>1} \quad .
\end{aligned} \tag{C.7.1}$$

D MPA im Fall $\frac{p_3}{p_1} < 1$

Um im Fall $\frac{p_3}{p_1} < 1$ eine zweidimensionale Darstellung der Algebra (4.4.4.13) zu finden, die nur reelle Parameter enthält, wählt man zunächst wieder den Ansatz (4.4.4.19). Im Unterschied zu (4.4.4.20), wählt man nun jedoch die Matrizen E und D in der Form :

$$E = \begin{pmatrix} e & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \qquad D = \begin{pmatrix} d & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{D.7.1}$$

Hieraus ergeben sich einige Veränderungen. Zunächst erhält man als Nebenbedingung zwischen e und d:

$$ed = \frac{1}{1 - f(p_1, \dots, p_4)} \quad . \tag{D.7.2}$$

Im folgenden verfährt man genau wie in 4.4. Es resultieren schließlich die selben Relationen zwischen den Gewichten p_i und $f(p_1, \dots, p_4)$ wie in (4.4.4.24).
Hieraus folgt nun mit $(D.7.2)$:

$$d = \frac{1}{e(1 - \frac{p_3}{p_1})} \quad . \tag{D.7.3}$$

Die Matrix $C = E + D$ ist von der Form:

$$C = \begin{pmatrix} e + d & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{D.7.4}$$

Sie hat die Eigenwerte:

$$\lambda_\pm = \frac{e + \frac{1}{e(1-\frac{p_3}{p_1})}}{2} \pm \sqrt{\frac{(e + \frac{1}{e(1-\frac{p_3}{p_1})})^2}{4} - 1} \quad . \tag{D.7.5}$$

Da C nun nicht mehr symmetrisch ist, sind die zu $\lambda_\pm$ gehörenden Eigenvektoren nicht notwendig orthogonal zueinander. Daher gestaltet sich die Berechnung der betrachteten Erwartungswerte ein wenig aufwendiger als im symmetrischen Fall.
Zunächst wähle man die kanonische Standardbasis des $\mathbb{R}^2$:

$$|e_1\rangle = (1,0)^t, \quad |e_2\rangle = (0,1)^t \quad . \tag{D.7.6}$$

Ferner sind

$$|v_{R+}\rangle = (-\lambda_+, 1)^t, \qquad |v_{R-}\rangle = (-\lambda_-, 1)^t \tag{D.7.7}$$

rechte Eigenvektoren zu λ_+ und λ_-. Aus diesen Eigenvektoren bildet man nun eine Matrix U wie folgt:

$$U = \begin{pmatrix} -\lambda_+ & -\lambda_- \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{D.7.8}$$

Diese Matrix U besitzt die Inverse:

$$U^{-1} = \frac{1}{\lambda_- - \lambda_+} \begin{pmatrix} 1 & \lambda_- \\ -1 & -\lambda_+ \end{pmatrix} \quad . \tag{D.7.9}$$

Für das Matrizenprodukt $U^{-1}CU$ folgt hiermit:

$$U^{-1}CU = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad . \tag{D.7.10}$$

Die Berechnung der Spur eines Matrixprodukts AC^k, wobei A eine beliebige Matrix ist und $k \in \mathbb{N}$, vereinfacht sich hierdurch beträchtlich. Es gilt dann:

$$\mathrm{Tr}[AC^k] = \sum_{i=1}^{2} \langle e_i|AC^k|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{2} \langle e_i|U^{-1}AUU^{-1}C^kU|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{2} \lambda_i \langle e_i|U^{-1}AU|e_i\rangle \quad , \tag{D.7.11}$$

wobei hier $\lambda_1 = \lambda_+$ und $\lambda_2 = \lambda_-$ gilt.
Im thermodynamischen Limes erhält man dann hieraus für die Dichte

$$\rho = \frac{d - \lambda_-}{\lambda_+ - \lambda_-} \quad . \tag{D.7.12}$$

Für die Clusterwahrscheinlichkeitsverteilung ergibt sich:

$$C_n = \left(\frac{d}{\lambda_+}\right)^n \frac{e - \frac{1}{\lambda_+}}{d} \quad . \tag{D.7.13}$$

Schließlich folgt für den Strom:

$$f = \frac{\frac{1}{\lambda_+^3}}{\lambda_+ - \lambda_-} \{(p_1 - p_2)(ed - 1)(e\lambda_+ - 1) + p_3 d(e\lambda_+ - 1)(d - \lambda_-) - p_4 d\lambda_+(ed - 1)\} \quad , \tag{D.7.14}$$

mit d wie in $(D.7.3)$.

Literaturverzeichnis

[1] M. Schreckenberg, A. Schadschneider, K. Nagel, N. Ito: *Discrete stochastic models for traffic flow*, Phys. Rev. **A51**, 2939 (1994)

[2] A. Bachem, M. Schreckenberg (Hrsg.): *Traffic and Granular Flow*, World Scientific (1996)

[3] M. Schreckenberg, D. Wolf (Hrsg.): *Traffic and Granular Flow '97*, Springer Verlag (1997)

[4] A. Deutsch, A. Lawniczak: *Probabilistic Lattice Models of Collektive Motion and Aggregation; from Individual to Collektive Dynamics*, Math. Bioscienc. **532**

[5] A. Mogilner, A. Deutsch, J. Cook: *Models for Spatio-angular Self-organization in Cell Biology*, Dynamics of Cell and Tissue Motion (1997)

[6] T. Vicsek, A. Czirok, E. Ben-Jacob, I. Cohen, O. Shochet: *Novel Type of Phase Transition in a System of Self-Driven Particles*, Phys. Rev. Lett. **A75**, 1226 (1995)

[7] O. O'Loan, M. Evans: *Alternating steady state in one-dimensional flocking*, J. Phys. A (1998)

[8] A. Deutsch: *A New Mechanism of Aggregation in a Lattice-Gas Cellular Automaton Model*, Mathem. and Comp. Modelling: im Druck

[9] H. Bussemaker, A. Deutsch, E. Geigant: *Mean-Field Analysis of a Dynamical Phase Transition in a Cellular Automaton Model for Collective Motion*, Phys. Rev. Lett. **78**, 5018 (1997)

[10] F. Jülicher, A. Ajdari, J. Prost: *Modeling molecular motors*, Rev. Mod. Phys. **A69**, 1269 (1997)

[11] J. Kärger, K. Hahn, V. Kukla, C. Rödenbeck *Moleküle im Gänsemarsch*, Phys. Bl. **54**, 9 (1998)

[12] D. Stauffer: *Biologically motivated Monte Carlo: Immunology and ageing*, Lago di Como Summer School on Computational Physics, herausgegeben von K. Binder u. C. Cicotti, Italian Physical Society (1996)

[13] R. B. Pandey: *A Stochastic Cellular Automata Approach to Cellular Dynamics for HIV: Effect of Viral Mutation*, Theo. Bioscience **A117**, 32 (1998)

[14] H. Bussemaker: *Pattern Formation and Correlations in Lattice Gas Automata*, Universität Utrecht, Dissertationsschrift (1995)

[15] E. Ben-Jacob: *From snowflake formation to growth of bacterial colonies I: Diffusive pattering in azoic systems*, Cont. Phys. **34**, 247 (1993)

[16] E. Ben-Jacob: *From snowflake formation to growth of bacterial colonies II: Cooperative formation of complex colonial patterns*, Cont. Phys. **38**, 205 (1997)

[17] E. Callen, D. Shapero: *A theory of social imitation*, Phys. Today (1974)

[18] I. Cohen, I. Golding, Y. Kozlovsky, E. Ben-Jacob: *Continuous And Discrete Models Of Cooperation In Complex Bacterial Colonies*, Continuum Models and Discrete Systems, Proceedings of the 9th International Symposium

[19] J. Toner, Y. Tu: *Flocks, herds and schools: A quantitativ theory of flocking*, Phys. Rev E **A58**, 4 (1998)

[20] Y. Tu, J. Toner, M. Ulm: *Sound Waves and the Absence of Galilean Invariance in Flocks*, Phys. Rev. Lett. **80**, 21 (1998)

[21] N. Rajewski: *Exact results for one-dimensional stochastic processes*, Universität Köln, Dissertationsschrift (1997)

[22] N. Rajewsky, L. Santen, A. Schadschneider, M. Schreckenberg: *The asymmetric exclusion process: Comparison of update procedures*, J. Stat. Phys. **92**, 151 (1998)

[23] A. Schadschneider, M. Schreckenberg: *Car-oriented mean-field theory for traffic flow models*, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, L69 (1996)

[24] A. Schadschneider: *Analytical approaches to cellular automata for traffic flow: Approximations and exact solutions*, in: Traffic and Granular Flow '97, 417 (1997)

[25] A. Klümper, A. Schadschneider, J. Zittartz: *Equivalence and solution of anisotropic spin-1 models and generalized $T-J$ fermion models in one dimension* , J. Phys. A: Math. Gen. **24**, L955 (1991)

[26] A. Klümper, A. Schadschneider, J. Zittartz: *Groundstate properties of a generalized VBS-model*, Z.Phys.B**87**, 281 (1992)

[27] A. Klümper, A. Schadschneider, J. Zittartz: *Matrix-product-groundstates for one-dimensional spin-1 quantum antiferromagnets*, Europhys.Lett. **24**, 293 (1993)

[28] H. Niggemann, J. Zittartz: *Optimum ground states for spin-3/2 ladders with two legs*, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 9819 (1998)

[29] H.-J. Mikeska, A. Kolezhuk: *Finitely correlated generalized spin ladders*, Int. J. Mod. Phys. B **12**, 2325 (1998)

[30] B. Derrida, M. Evans, V. Hakim, V. Pasquier: *Exact Solution of a 1D Asymmetric Exclusion Model Using a Matrix Formulation*, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 1493 (1993)

[31] G. Schütz, E. Domany: *Phase Transitions in an Exactly Soluble One-Dimensional Exclusion Process*, J. Stat. Phys. **72**, 277 (1993)

[32] N. Rajewsky, M. Schreckenberg: *Exact results for one-dimensional cellular automata with different types of updates*, Physica **A245**, 139 (1997)

[33] I. Oppenheim, K. Shuler, G. Weiss: *Stochastic processes in chemical physics: The master equation*, MIT Press (Cambridge) (1977)
in:
van Kampen N G 1992 *Stochastic processes in physics and chemistry*, Elsevier (Amsterdam)

[34] F. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel, V. Rittenberg: *Reaction-Diffusion Processes, Critical Dynamics, and Quantum Chains*, Ann. Phys. **230**, 250 (1994)

[35] H. Hinrichsen, S. Sandow, P. Peschel: *On matrix product ground states for reaction-diffusion models*, J. Phys. A: Math. Gen. **29**, 2643 (1996)

[36] K. Krebs, S. Sandow: *Matrix product eigenstates for one-dimensional stochastic models and quantum spin chains*, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 3165 (1997)

[37] K. Klauck, A. Schadschneider: *On the ubiquity of matrix-product states in one-dimensional stochastic processes with boundary interactions*, zur Veröffentlichung angenommen in Physica A

[38] K. Klauck, persönliche Mitteilungen

[39] D. Stauffer,A. Aharony: *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis (1994)

Danksagung

Zunächst möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. J. Zittartz bedanken, der mir die Durchführung dieser Diplomarbeit ermöglicht hat.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. A. Schadschneider für die Anregung zu dieser Arbeit und die hervorragende fachliche Betreuung.

Desweiteren möchte ich vor allem Herrn Dipl. Phys. K. Klauck für seine stete Diskussions- und Hilfsbereitschaft im Verlauf der gesamten Diplomarbeit danken.

Weiterhin danke ich den Herren Dr. L. Santen, G. Diedrich, R. Raupach, A. Bühler und C. Knetter für so manches konstruktive Gespräch im Verlauf des letzten Jahres.

Für das Korrekturlesen dieser Arbeit geht mein Dank an die Damen und Herren Dr. A. Schadschneider, Dipl. Phys. K. Klauck, S. Bach, H. Kirchner und Dipl. Phys. C. Scheeren.

Meinen Eltern danke ich dafür, daß sie mich während meines gesamten Studiums in jeder erdenklichen Art und Weise unterstützt haben.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß die vorliegende Arbeit von mir selbstständig angefertigt wurde. Dabei habe ich außer den angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel verwendet.

Ansgar Kirchner