

# فرآیندهای پخش و برهم کنش

وحیدکریمی پور- دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۱۰ فروردین ۱۳۹۹

## ۱ مقدمه

در درس گذشته با تمرکز بر یک مثال ایده های کلی مربوط به فرآیندهای تصادفی را یاد گرفتیم. آموختیم که معادله مارکوفی برای این فرآیندها چگونه نوشته و چگونه حل می شود. در این درس تمرکز خود بر دسته وسیعی از این فرآیندها می نهیم که نام کلی فرآیندهای پخش و برهم کنش<sup>۱</sup> بر آنها نهاده شده. در این نوع فرآیندها، همانگونه که از نام آنها پیداست، ذرات در یک محیط پخش می شوند (مثل ولگشت) و درعین حال باهم واکنش نیز می کنند (مثل واکنش های شیمیایی). در این واکنش ها ممکن است ذرات از بین بروند یا اینکه ذرات جدیدی تولید شوند یا ممکن است که فقط با هم برهم کنش کنند. به عنوان مثال ذراتی را در نظر بگیرید که در یک شبکه یک بعدی ولگشت انجام می دهند. قبلا دینامیک تصادفی یکی از این ذرات را به دقت مطالعه کرده ایم. اما حالا با چند ذره مواجهیم که یکدیگر را می بینند و برهم تاثیر می گذرانند. مثلا یک ذره در حالت عادی با احتمال مساوی به جایگاه سمت راست یا سمت چپ می رود، اما اگر جایگاه سمت راست آن پر باشد طبیعی است که امکان حرکت به جلو برای این ذره وجود ندارد. معنای این حرف این است که بین ذرات یک نوع برهم کنش وجود دارد و ما در این مثال با نوعی از ولگشت برای ذرات سروکار داریم که در آن ذرات با هم برهم کنش نیز می کنند. برای سادگی فرض کنید که فقط یک نوع ذره داریم نه چند نوع. هر جایگاه می تواند در دو وضعیت خالی یا پر قرار بگیرد. شکل (۱).

<sup>۱</sup> Reaction Diffusion



شکل ۱: یک پیکربندی دلخواه از ذرات روی یک شبکه یک بعدی. این نوع فرایندها در ابعاد مختلف پدیدار می شوند.

این دو وضعیت را به ترتیب با 0 و 1 نشان می دهیم. بنابراین اگر دو جایگاه پشت سر هم را در نظر بگیریم، مجموعاً می توانند در چهار وضعیت مختلف قرار بگیرند. در هر واحد زمانی هر کدام از این چهار وضعیت هر کدام می توانند به چهار وضعیت مختلف دیگر تغییر پیدا کنند. مجموعه این تغییرات یا پرش ها کلیه فرایندهای موضعی ای را بیان می کنند که در کلی ترین فرایند می توانند وجود داشته باشند. البته خیلی از فرایندها هستند که تنها با دو یا کمی بیشتر از این واکنش های موضعی تعریف می شوند. قبل از مطالعه این مثالها بیایید کلیه این واکنش های موضعی را مرور کنیم: در زیر کلیه واکنش های ممکن نوشته شده اند. در بعضی از آنها نیز نام رایج آنها نوشته شده است:

0 0	→	0 0	جمله قطری	
0 0	→	0 1	خلق ذره در سمت راست	
0 0	→	1 0	خلق ذره در سمت چپ	
0 0	→	1 1	خلق جفت ذره	(۱)
0 1	→	0 0	نابودی ذره در سمت راست	
0 1	→	0 1	جمله قطری	

$$\begin{array}{lll}
01 \longrightarrow 10 & \text{پرش ذره به چپ} & \\
01 \longrightarrow 11 & \text{خلق ذره در سمت چپ} & (2)
\end{array}$$

$$\begin{array}{lll}
10 \longrightarrow 00 & \text{نابودی ذره در سمت چپ} & \\
10 \longrightarrow 01 & \text{پرش ذره به راست} & \\
10 \longrightarrow 10 & \text{جمله قطری} & \\
10 \longrightarrow 11 & \text{خلق ذره در راست} & (3)
\end{array}$$

$$\begin{array}{lll}
11 \longrightarrow 00 & \text{نابودی جفت ذره} & \\
11 \longrightarrow 01 & \text{نابودی ذره در سمت چپ} & \\
11 \longrightarrow 10 & \text{نابودی ذره در سمت راست} & \\
11 \longrightarrow 11 & \text{جمله قطری} & (4)
\end{array}$$

معلوم است که در این نوع فرایند، به طور کلی تعداد ذرات ثابت نیست و تغییر می کند. بنابراین اگر تعداد جایگاه های شبکه را با  $N$  نشان بدهیم، آنگاه تابع احتمالی که در جستجوی آن هستیم عبارت است از:

$$P(n_1, n_2, \dots, n_N; t) \quad n_i = 0, 1. \quad (5)$$

این تابع در واقع احتمال وجود هر پیکربندی ای را در زمان  $t$  بدست می دهد. دقت کنید که واکنش های شانزده گانه بالا کلیه واکنش های ممکن در دو جایگاه را نشان می دهد. این واکنش ها هرکدام با نرخ احتمال مخصوص به خود رخ می دهند و بعضی از این نرخ ها ممکن است صفر باشند. بسته به اینکه این نرخ ها چگونه باشند، یک دسته خاص از فرایندها تعریف می شوند. یکی از مهم ترین این فرایندها فرایند نامتقارن پخش و طرد<sup>۲</sup> است که از بین همه فرایندها اهمیت ویژه ای دارد. دلیل این اهمیت هم در سادگی آن است و هم در انطباق پذیری اش بر بسیاری از پدیده های دیگر. در این فرایند تنها نرخ احتمال غیرقطری نرخ زیر است:

$$10 \longrightarrow 01 \quad \lambda \quad (6)$$

Asymmetric Simple Exclusion Process (ASEP)<sup>۲</sup>

که در آن  $\lambda$  نرخ گذار است. در این فرایند هر ذره ای به شرط اینکه جایگاه سمت راست آن خالی باشد با نرخ  $\lambda$  به سمت راست می پرد (یعنی در زمان  $dt$  درصد از ذراتی که در این وضعیت هستند، به سمت راست می پرند) و چنانچه جایگاه سمت راست ذره پر باشد، این پرش صورت نمی گیرد زیرا در هر جایگاه بیش از یک ذره جای نمی گیرد. به همین دلیل است که برای این واکنش نام پخش و طرد انتخاب شده است. نام «نامتقارن» نیز به این دلیل انتخاب شده است که ذرات فقط به سمت راست پرش می کنند. در فرایند پخش و واکنش نامتقارن نرخ های غیر صفر این ها هستند:

$$\begin{aligned} 10 &\longrightarrow 01 && \lambda \\ 01 &\longrightarrow 10 && \mu. \end{aligned} \quad (7)$$

هم چنین می توان فرایندهایی با انواع مختلفی از ذرات را بررسی کرد. مثلا فرایندهایی با دو نوع ذره که آنها را با  $A$  و  $B$  نشان می دهیم و با واکنش هایی مثل زیر:

$$\begin{aligned} AB &\longrightarrow 00 \\ BA &\longrightarrow 00 \\ A0 &\longrightarrow 0A \\ B0 &\longrightarrow 0B \\ 0A &\longrightarrow A0 \\ 0B &\longrightarrow B0, \end{aligned} \quad (8)$$

که هر کدام با نرخ های متفاوت صورت می گیرند. یک نوع دیگر فرایندهایی هستند که در آنها در هر جایگاه شبکه بیش تر از یک ذره جای می گیرند ولی نهایتا هر جایگاه تعداد بیشینه ای ذره مثلا  $p$  تا را در خود جای می دهد. برای چنین فرایندهایی یک مجموعه واکنش های اصلی به شکل زیر هستند:

$$k l \longrightarrow k - 1 l + 1 \quad \text{with rate } \mu_{k,l} \quad \text{if } l < p \quad (9)$$

و بقیه نرخ های غیرقطری همه مساوی صفر هستند.

## ۲ فرآیند کاملاً نامتقارن پخش و طرد

در این بخش توجه خود را به حل فرآیند کاملاً نامتقارن پخش و واکنش معطوف می‌کنیم. رفتار این فرآیند کاملاً به شرایط مرزی وابسته است. در شرایط مرزی بسته رفتار خیلی ساده ای دارد و در شرایط مرزی باز یعنی وقتی که ذرات می‌توانند به شبکه وارد و یا از آن خارج شوند رفتاری غنی و پیچیده خواهد داشت. نخست شرایط مرزی بسته را بررسی می‌کنیم.

### ۱.۲ شرایط مرزی تناوبی

می‌توانید تصور کنید که کل فرآیند روی یک شبکه دایره ای شکل رخ می‌دهد. در این شرایط تعداد ذرات ثابت است. معادله مارکوفی به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n_1, n_2, \dots, n_N) = \lambda \sum_{i=1}^N P(n_1, n_2, \dots, n_{i-1} + 1, n_i - 1, \dots, n_N) - \lambda \sum_{i=1}^N P(n_1, n_2, \dots, n_N). \quad (10)$$

جمله اول طرف راست بیان می‌کند که چه هیئت‌هایی می‌توانند به هیئت  $P(n_1, n_2, \dots, n_i \dots n_N)$  تبدیل شوند و جمله دوم طرف راست هم بیان می‌کند که این هیئت چگونه به هیئت‌های دیگر تبدیل می‌شود. هدف ما پیدا کردن حالت پایای<sup>۳</sup> این سیستم است، یعنی حالتی که فرآیند در زمان طولانی به آن می‌رسد و دیگر چیزی با زمان تغییر نمی‌کند. چگونه می‌توان چنین معادله پیچیده ای را حل کرد؟ پاسخ اش در این مورد خاص یعنی در شرایط مرزی بسته خیلی ساده است. یک حدس می‌زنیم و آن اینکه تابع احتمال یک مقدار ثابت مستقل از زمان است و به نوع هیئت بستگی ندارد، به عبارت بهتر همه هیئت‌ها هم احتمال هستند. بنابراین قرار می‌دهیم:

$$P(n_1, n_2, \dots, n_N, t) = c. \quad (11)$$

آیا چنین چیزی حل معادله (۱۰) است؟ پاسخ مثبت است زیرا معادله را تبدیل به  $0 = 0$  می‌کند. اما از کجا معلوم که این تنها جواب معادله (۱۰) باشد؟ پاسخ اش در یک قضیه است.

■ قضیه: هر دستگاه کاتوره ای که فضای هیئت‌هایش همبند باشد، حالت پایایش یکتاست. معنای همبند بودن این است که با حرکت‌های

ابتدایی مارکوف (نظیر آنچه که در روابط (۱) آمده است)، هر دو نقطه ای را از فضای هیئت‌ها بتوان به هم متصل کرد.

---

<sup>۳</sup>Steady State

با یک نگاه به این فرایند معلوم می شود که فضای هیئت ها متصل است و بنابراین حالت پایای این سیستم یکتا و همانی است که یافته ایم. حال باقی مانده است که مقدار  $c$  را پیدا کنیم. ولی مقدار  $c$  از تعداد کل هیئت ها یافته می شود. تعداد کل هیئت ها برابر است با:

$$\Omega = \binom{N}{m} \quad (12)$$

که در آن  $m$  تعداد ذراتی است که از ابتدا در شبکه وجود داشته اند. بنابراین

$$P_s(n_1, n_2, \dots, n_N) = c = \frac{1}{\binom{N}{m}}. \quad (13)$$

حال می توانیم متوسط کمیت های مختلفی را حساب کنیم. نخست مقدار متوسط تعداد ذرات در جایگاه  $k$  ام که آن را با  $\langle n_k \rangle$  نشان می دهیم. داریم

$$\langle n_k \rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} P(n_1, n_2, \dots, 1 \dots n_N) \quad (14)$$

در طرف راست باید همه هیئت هایی را بشمریم که در خانه  $k$  ام یک ذره قرار دارد و بقیه ذرات در بقیه نقاط پخش شده اند. تعداد این هیئت ها برابر است با:  $\binom{N-1}{m-1}$ . بنابراین خواهیم داشت:

$$\langle n_k \rangle = c \binom{N-1}{m-1} = \frac{\binom{N-1}{m-1}}{\binom{N}{m}} = \frac{m}{N}. \quad (15)$$

این نتیجه مورد انتظار هم هست زیرا بیان کننده این است که چگالی ذرات در تمام شبکه یکسان است. حال می خواهیم جریان را حساب کنیم. جریان ذرات از جایگاه  $k$  به جایگاه  $k+1$  را با  $J_k$  نشان می دهیم. این جریان نشان دهنده چگالی ذرات ضرب در سرعت حرکت آنها به طرف راست است. به صورت میکروسکوپی که به این کمیت نگاه کنیم می توانیم بگوییم که در بازه زمانی  $dt$  احتمال عبور یک ذره از جایگاه  $k$  به جایگاه  $k+1$  است. این احتمال برابر است با نرخ عبور  $\lambda$  ضرب در احتمال پر بودن جایگاه  $k$  ام و در عین حال خالی بودن جایگاه  $k+1$  ام، یا

$$J_k = \lambda P(n_k = 1, n_{k+1} = 0) \quad (16)$$

باز هم باید تعداد کل هیئت هایی که با این شرط سازگار هستند بشمریم و ضرب در احتمال هر هیئت کنیم. نتیجه برابر است با:

$$J_k = \lambda \times \frac{\binom{N-2}{m-1}}{\binom{N}{m}} = \lambda \frac{M(N-M)}{N(N-1)}. \quad (17)$$

طبیعی است که جریان به اندیس  $k$  نباید وابستگی پیدا کند زیرا ما در حال بررسی حالت پایا هستیم و اگر چنین نباشد، یعنی جریان وابسته به جایگاه باشد، به این معناست که ذرات در جایی در حال انباشته شدن اند که با پایا بودن حالت همخوانی ندارد. اگر در حد  $N$  های بزرگ چگالی را با  $\rho$

نشان دهیم، آنگاه جریان برابر خواهد بود با

$$J = \lambda\rho(1 - \rho). \quad (18)$$

آیا می توان جریان را به صورت متوسط کمیت هایی در نظر گرفت؟ پاسخ این سوال مثبت است. در واقع اگر خوب دقت کنیم کمیتی که در طرف راست رابطه (۱۶) نوشته ایم یک نوع تابع همبستگی است و در واقع می توانیم بنویسیم:

$$J_k = \lambda\langle n_k(1 - n_{k+1}) \rangle. \quad (19)$$

رابطه پیوستگی برای این جریان نیز به شکل زیر نوشته می شود:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n_k \rangle = \lambda \langle n_{k-1}(1 - n_k) \rangle - \lambda \langle n_k(1 - n_{k+1}) \rangle = J_{k-1} - J_k. \quad (20)$$

این رابطه هم چنین نشان می دهد در صورتی که جریان به مکان وابسته باشد، انباشتگی چگالی در یکی از نقاط بوجود می آید و این انباشتگی با زمان ادامه پیدا می کند.

■ تمرین: رابطه بالا را ثابت کنید. برای اثبات دو راه متفاوت می توانید طی کنید: در راه اول می توانید از معادله مارکوفی و تعریف  $\langle n_k \rangle$  استفاده کنید. راه دوم یک راه شهودی است که مبتنی بر معادله پیوستگی جریان و چگالی است.

## ۲.۲ شرایط مرزی باز

فرایند پخش و طرد نامتقارن در شبکه یک بعدی باز دارای ساختاری بسیار غنی است. نخست به تعریف این فرایند توجه می کنیم. در روی زنجیره هر ذره ای که جایگاه سمت راست آن خالی باشد با نرخ احتمال  $\lambda$  به سمت راست می پرد. با تغییر مقیاس زمان همواره می توانیم این نرخ پرش را برابر با یک بگیریم. کاری که در اینجا و در ادامه این درس انجام خواهیم داد. وقتی که ذره به آخرین جایگاه سمت راست می رسد با نرخ  $\beta$  از شبکه خارج می شود و هرگاه که آخرین جایگاه سمت چپ خالی باشد، با نرخ  $\alpha$  ذره ای به این جایگاه وارد می شود. بسته به این دو مقدار این سیستم می تواند در فازهای مختلفی قرار بگیرد. به همین دلیل این نوع پدیده ها را گذار فاز های القا شده از مرز<sup>۴</sup> می گوئیم. در مکانیک آماری تعادلی می دانیم که شرایط مرزی اثری در رفتار ترمودینامیکی ندارد اما در اینجا با یک پدیده عدم تعادل سروکار داریم و شرایط مرزی نه تنها مهم هستند بلکه می توانند منجر به ظهور فازهای مختلف در درون شبکه شوند. البته این پدیده از نظر فیزیکی و شهودی کاملاً قابل درک است. مثلاً حالتی را تصور کنید که  $\beta \gg \alpha \gg 1$  است. در این صورت ذرات با نرخی بیشتر از آنکه ذرات بتوانند حرکت کنند  $\alpha \gg 1$  وارد شبکه

<sup>۴</sup>Boundary Induced Phase Transitions

می شوند و ذرات از شبکه هم به ندرت خارج می شوند چون  $\beta \gg 1$  است. بنابراین واضح است که حالت پایای این فرایند حالتی است که کل شبکه با ذرات پر شده است و جریان ذرات در درون شبکه نیز صفر است. این درست مثل یک اتوبان پر از اتومبیل است که همه اتومبیل ها نهایتاً به توقف کامل رسیده اند. در یک حد دیگر فرض کنید که  $\beta \ll 1 \ll \alpha$  است. در این صورت حالت پایا یک حالت خالی از ذرات است. زیرا ذره به ندرت به شبکه وارد می شود و وقتی هم ذره ای وارد می شود خیلی زود خود را به انتها می رساند  $1 \ll \alpha$  و در انتها هم ذرات خیلی زود تخلیه می شوند  $1 \ll \beta$ . حالت پایه در اینجا یک شبکه کاملاً خالی است. این درست مثل یک اتوبان کاملاً خالی است که به ندرت در آن اتومبیلی دیده می شود. اما وضعیت جالب و قابل مطالعه وقتی است که از این دو حالت حدی فاصله بگیریم و از خود بپرسیم که دیاگرام فاز این فرایند یا این مدل برحسب تمام مقادیر  $\alpha$  و  $\beta$  چیست. در هر فاز جریان چقدر است و چگالی ذرات چقدر؟ چگالی ذرات چگونه با فاصله از دو انتهای شبکه تغییر می کند. این ها سوالات مهمی است که باید به آن ها پاسخ بگوییم.

حال که در باره سوال ها بحث کرده ایم بجاست در باره روش های حل نیز حرف بزنیم. مثل مکانیک آماری تعادلی برای حل چنین مسئله ای نخست به سراغ روش میدان متوسط می رویم. انتظار داریم که این روش جواب قابل قبول ولی نه چندان دقیقی از کیفیات کلی این فرایند به دست دهد. البته به یاد هم داریم که نظریه میدان متوسط معمولاً وقتی پاسخ های خوبی فراهم می کند که بعد یک دستگاه یا تعداد همسایگان یک ذره زیاد باشد و جواب های آن چه بسا در یک بعد که تعداد همسایگان کمترین مقدار ممکن است نه تنها غیردقیق بلکه یکسره نادرست باشند. ولی به هر حال بد نیست به عنوان اولین راه حل به آن نگاه کنیم. سپس به سراغ روش های دقیق تر می رویم تا اشکالات روش میدان متوسط را اصلاح کنیم.

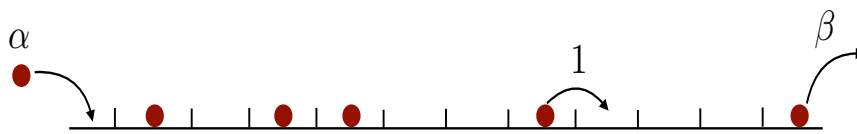
### ۳ روش میدان متوسط

تقریب میدان متوسط همواره اولین تقریبی است که برای حل مسایل بس ذره ای چه در مکانیک آماری تعادلی و چه در مکانیک آماری عدم تعادل به کار برده می شود. در این گونه مسایل ما همواره با یک تابع احتمال بس ذره ای مواجهیم که آن را با

$$P(s_1, s_2, \dots, s_N) \quad (21)$$

نشان می دهیم. متغیرهای  $s_i$  می توانند نشان دهنده وضعیت هر کدام از ذرات باشند. این وضعیت می تواند نشان دهنده اسپین یک ذره یا بود و نبود آن ذره در یک جایگاه شبکه یا هر متغیر دیگری باشد. از آنجا که پیدا کردن این تابع احتمال بسیار دشوار است در تقریب میدان متوسط فرض





شکل ۲: فرایند پخش و طرد نامتقارن در یک شبکه باز.

می کنیم که این تابع شکل ساده زیر را دارد:

$$P(s_1, s_2, \dots, s_N) = P_1(s_1)P_2(s_2) \dots P_N(s_N). \quad (22)$$

توابع احتمال  $P_i$  می توانند با هم متفاوت نیز باشند ولی در سیستم های همگن معمولا فرض می کنیم که این توابع با هم یکسان است. با این تقریب مسئله بسیار ساده می شود. خاصیت اصلی این فرض ساده کننده این است که همبستگی ها را نادیده می گیرد زیرا با این تابع جدید حتما شرط زیر برقرار است:

$$\langle S_i S_j \rangle = \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle. \quad (23)$$

این تقریب البته وقتی تقریب خوبی است که تعداد همسایه های یک ذره بسیار زیاد باشد. در مسئله پخش و واکنش وقتی می خواهیم روش میدان متوسط را به کار ببریم گسسته بودن شبکه را فراموش می کنیم و مختصه هر نقطه را یک کمیت پیوسته مثل  $x$  در نظر می گیریم و چگالی ذرات را در این نقطه با  $\rho(x)$  و جریان ذرات را با  $J(x)$  نشان می دهیم. به عنوان یک تقریب دیگر فرض می کنیم که چگالی تابعی مستقیم از جریان است یعنی

$$J(x) = J(\rho(x)). \quad (24)$$

سپس به معادله پیوستگی می رسیم که عبارت است از:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (25)$$

که با توجه به رابطه (۲۴) به شکل زیر در می آید:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + J'(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (۲۶)$$

می توانیم با تعریف

$$v_g := J'(\rho)$$

به عنوان سرعت گروه<sup>۵</sup>، رابطه بالا را به صورت زیر بنویسیم:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + v_g(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0. \quad (۲۷)$$

حل کلی این معادله به صورت زیر است:

$$\rho(x, t) = f(x - v_g(\rho), t) \quad (۲۸)$$

که نشان دهنده این است که طرح چگالی اولیه<sup>۶</sup> با سرعت  $v_g$  به سمت راست حرکت کند. خوب این معادله به همین شکل حل کامل نیست چرا که در طرف راست کمیت  $v_g(\rho)$  وجود دارد که خود بستگی به چگالی دارد. ولی می توانیم کارهایی برای حل آن انجام دهیم. نخست دقت می کنیم که شکل اولیه طرح چگالی در رابطه زیر صدق می کند:

$$\rho(x, 0) = f(x). \quad (۲۹)$$

از طرفی می دانیم که سرعت ذرات از رابطه  $J = c\rho$  تعیین می شود. بنابراین با دو نوع سرعت سروکار داریم:

$$c = \frac{J}{\rho} \quad v_g = \frac{dJ}{d\rho} = J'(\rho). \quad (۳۰)$$

اولی سرعت ذرات و دومی سرعت جبهه موج است. رابطه این دو نیز از این قرار است:

$$v_g = \frac{dJ}{d\rho} = \frac{d}{d\rho}(c\rho) = \frac{dc}{d\rho} + c \quad (۳۱)$$

از نظر شهودی انتظار داریم وقتی که چگالی ذرات بالاست (یا ازدحام زیاد است) سرعت حرکت ذرات کم تر باشد. بنابراین انتظار داریم که

$$\frac{dc}{d\rho} < 0. \quad (۳۲)$$

---

Group Velocity<sup>۵</sup>  
Density Profile<sup>۶</sup>

در نتیجه با توجه به رابطه قبلی خواهیم داشت:

$$v_g(\rho) < c. \quad (33)$$

معنای این رابطه این است که سرعت حرکت جبهه موج کمتر از سرعت حرکت ذرات است و همین امر پس از مدتی باعث ایجاد یک موج شوک می شود یعنی دیواره ای که یک ناحیه خیلی چگال را از یک ناحیه خلوت جدا می کند. این همان وضعیتی است که در هر ترافیک شلوغی در اتوبان ها می بینیم.

حال می توانیم سرعت حرکت موج شوک را محاسبه کنیم. برای این کار به شکل (۴) نگاه می کنیم. این شکل یک دیواره شوک را نشان می دهد که دو ناحیه چگال و رقیق را از هم جدا کرده است. سرعت حرکت این دیواره شوک را  $v_s$  می گیریم. در یک فاصله زمانی  $dt$  دیواره شوک به اندازه  $v_g dt$  جلو رفته است. در این فاصله ناحیه مشخص شده از یک ناحیه پرچگال به یک ناحیه کم چگال تبدیل شده و چگالی اش از  $\rho_2$  به  $\rho_1$  تبدیل شده. معادله پیوستگی را برای این ناحیه می نویسیم:

$$\begin{aligned} J_1 dt &= \text{تعداد ذراتی که به این ناحیه وارد می شوند.} \\ J_2 dt &= \text{تعداد ذراتی که از این ناحیه خارج می شوند.} \end{aligned} \quad (34)$$

بنابراین معادله پیوستگی به شکل زیر خواهد بود:

$$J_1 dt - J_2 dt = (\rho_1 - \rho_2) v_s dt \quad (35)$$

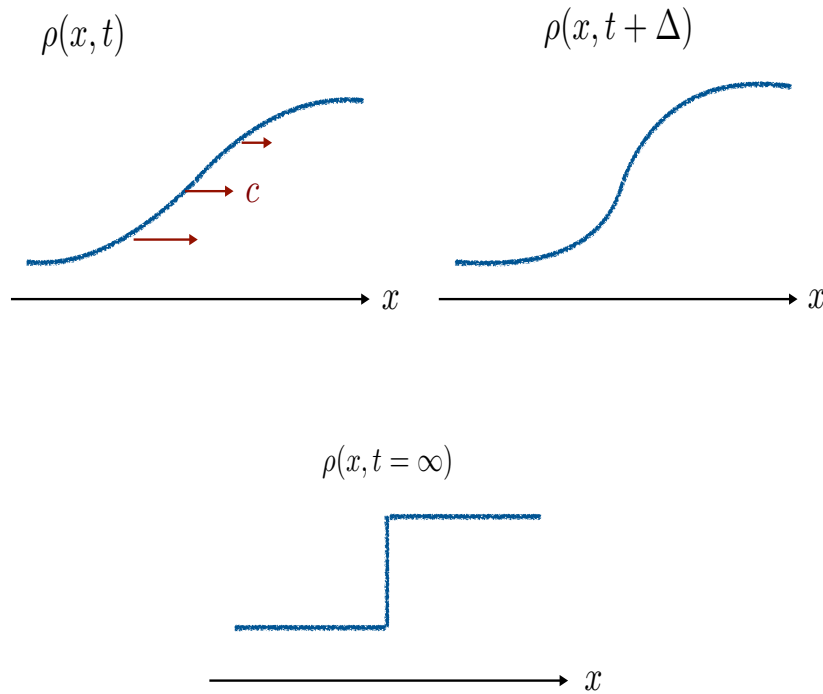
و در نتیجه

$$v_s = \frac{J_1 - J_2}{\rho_1 - \rho_2}. \quad (36)$$

در حل نظریه میدان یافتیم که  $J = \rho(1 - \rho)$ . بنابراین با توجه به روابط بالا بدست می آوریم:

$$v_g = 1 - 2\rho, \quad v_s = 1 - \rho_1 - \rho_2. \quad (37)$$

از این روابط می توانیم استفاده کنیم و دیاگرام فاز فرایند کاملاً نامتقارن پخش و واکنش را مشخص کنیم. این کاری است که در زیربخش بعدی انجام می دهیم.

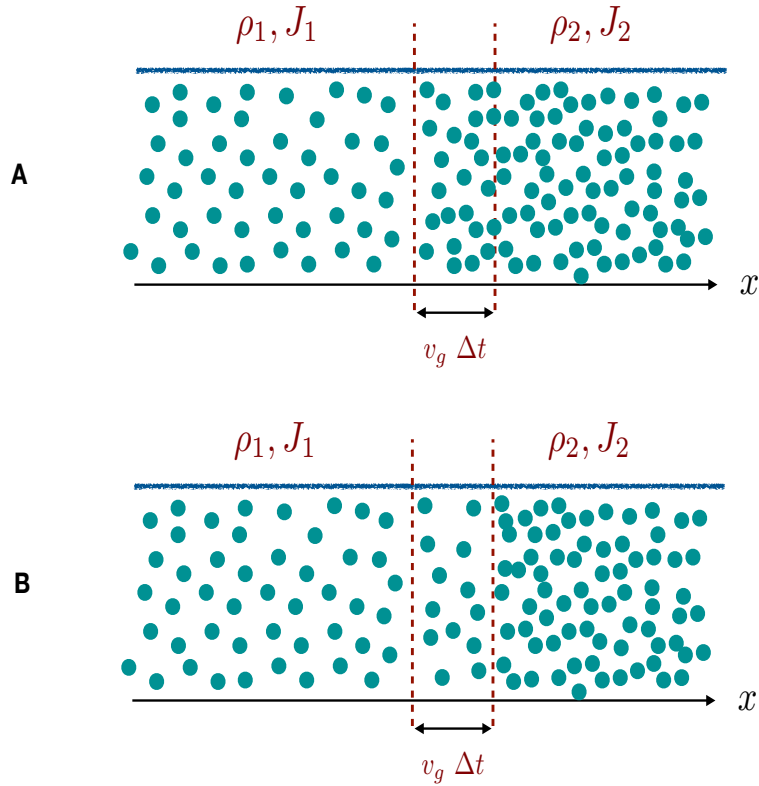


شکل ۳: چگونگی ایجاد موج شوک وقتی که  $\frac{dc}{d\rho} < 0$  است.

### ۱.۳ بدست آوردن دیاگرام فاز

شکل (۵) را در نظر می‌گیریم. این شکل دو منبع را نشان می‌دهد که به ابتدای شبکه یک بعدی وصل هستند. در واقع فرض می‌کنیم که یک منبع با چگالی  $\alpha$  در جایگاه صفرم شبکه قرار دارد و یک منبع با چگالی ثابت  $1 - \beta$  در جایگاه  $N + 1$  شبکه قرار دارد. چگالی این دو منبع در طول فرایند همواره ثابت می‌ماند. دلیل انتخاب این چگالی‌ها برای این دو منبع این است که نرخ ورود و خروج ذرات از شبکه به ترتیب  $\alpha$  و  $\beta$  باشد. دلیل این تساوی را می‌توان از محاسبات زیر فهمید و تعریف نرخ‌های  $\alpha$  و  $\beta$  فهمید: (یادآوری می‌کنیم که هر گاه جایگاه شماره یک خالی باشد یک ذره با نرخ  $\alpha$  به آن وارد می‌شود و هرگاه جایگاه  $N$  پر باشد، با نرخ  $\beta$  این جایگاه را ترک می‌کند):

$$J_0 \equiv \langle n_0(1 - n_1) \rangle = \langle \alpha(1 - 0) \rangle = \alpha, \quad J_N \equiv \langle n_N(1 - n_{N+1}) \rangle = \langle 1(1 - (1 - \beta)) \rangle = \beta. \quad (38)$$



شکل ۴: چگونگی محاسبه سرعت موج شوک. جزئیات در متن درس آمده است.

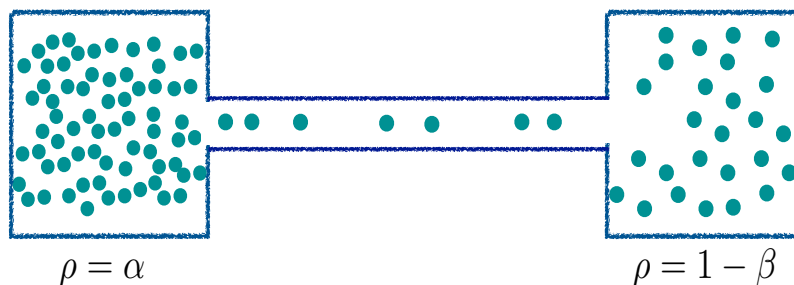
به این ترتیب برای سرعت گروه در ابتدا و انتهای شبکه داریم:

$$v_g(0) = 1 - 2\alpha \quad v_g(N) = 1 - 2(1 - \beta) = 2\beta - 1. \quad (39)$$

جهت قراردادی هر دو سرعت نیز به طرف راست است. به عبارت دیگر یک جبهه موج با سرعت  $v_g(0)$  از طرف چپ راه می افتد که در طرف چپ اش ذراتی با چگالی  $\alpha$  قرار دارند و یک جبهه موج نیز از طرف راست با سرعت  $v_g(N)$  راه می افتد که در طرف راستش ذراتی با چگالی  $1 - \beta$  قرار دارند. بسته به مقادیر این دو پارامتر و در نتیجه جهت سرعت این دو جبهه موج، فازهای مختلفی می تواند پدیدار شود.

**حالت اول:** در این حالت داریم:

$$\alpha < 1/2, \quad \beta < 1/2$$



شکل ۵: دو منبع با چگالی های ثابت در ورودی و خروجی همان اثری را دارند که عوامل تزریق ذره در سمت چپ یا تخلیه ذرات در سمت راست دارند.

در این حالت  $v_g(0) > 0$  و  $v_g(N) < 0$ . بنابراین دو جبهه موج در وسط به هم می رسند و یک دیواره شوک تشکیل می شود. سرعت حرکت این دیواره برابر است با:

$$v_s \equiv 1 - \rho_1 - \rho_2 = 1 - \alpha - (1 - \beta) = \beta - \alpha. \quad (40)$$

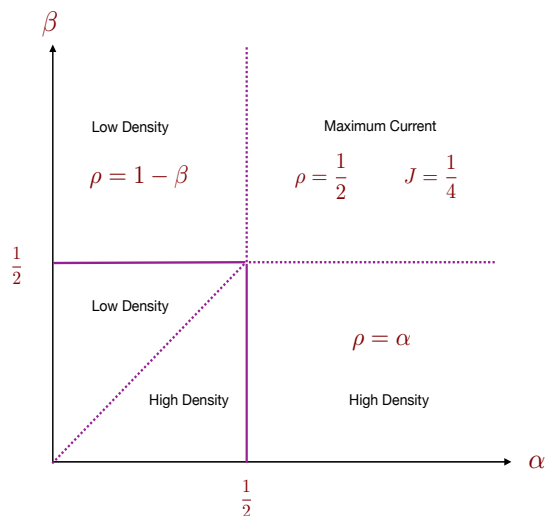
در نتیجه اگر  $\beta > \alpha$  آنگاه موج شوک به سمت راست حرکت می کند و تمام محیط از چگالی  $\alpha$  پر می شود که از این فاز را فاز کم-تراکم<sup>۷</sup> می نامیم. در این فاز داریم

$$\rho = \alpha < \frac{1}{2} \quad \text{Low Density Phase} \quad (41)$$

اگر  $\beta < \alpha$ ، آنگاه موج شوک به سمت چپ حرکت می کند و تمام محیط از چگالی  $1 - \beta$  پر می شود. این فاز را فاز پرتراکم<sup>۸</sup> می نامیم. در این فاز داریم

---

Low Density (LD)<sup>۷</sup>  
High Density (HD)<sup>۸</sup>



شکل ۶: دیاگرام فاز فرایند پخش و واکنش کاملاً نامتقارن.

$$\rho = 1 - \beta > \frac{1}{2} \quad \text{High Density Phase} \quad (42)$$

**حالت دوم:** در این حالت داریم:

$$\alpha < \frac{1}{2} \quad \beta > \frac{1}{2} \rightarrow v_g(0) > 0, v_g(N) > 0 \quad (43)$$

که در آن تمام محیط از چگالی  $\alpha$  پر می شود و بنابراین فاز کم تراکم پدیدار می شود یا

$$\alpha > \frac{1}{2} \quad \beta < \frac{1}{2} \rightarrow v_g(0) < 0, v_g(N) < 0 \quad (44)$$

که در آن تمام محیط از چگالی  $1 - \beta$  پر می شود، و در نتیجه فاز پر تراکم پدیدار می شود.

**حالت سوم:**

در این حالت داریم:

$$\alpha > \frac{1}{2} \quad \beta > \frac{1}{2} \rightarrow v_g(0) < 0, v_g(N) > 0. \quad (45)$$

در اینجا جهت حرکت جبهه های موج به گونه ای است که تاثیری در تعیین چگالی و جریان در داخل شبکه ندارند. برای تعیین وضعیت شبکه در این حالت بیشتر از این نمی توان پیش رفت و تنها با حل دقیق می توان در مورد فاز شکل گرفته آگاهی کسب کرد. حل دقیق نشان می دهد که تحت این شرایط داریم

$$\rho = \frac{1}{2} \quad J = \frac{1}{4}. \quad (46)$$

مجموعه این ملاحظات منجر به دیاگرام فازی می شود که در شکل (۶) نشان داده شده است.

### ۲.۳ تعیین طرح چگالی

تا کنون چیزی در باره طرح چگالی و تغییرات آن در طول شبکه نگفته ایم. حال زمان آن فرا رسیده که به این موضوع بپردازیم. نخست به معادله پیوستگی می پردازیم که تغییرات چگالی یک نقطه را بر حسب جریان های وارد شده به آن نقطه و خارج شده از آن نقطه بدست می دهد:

$$\frac{\partial \langle n_i \rangle}{\partial t} = \langle n_{i-1}(n_i - 1) \rangle - \langle n_i(n_{i+1} - 1) \rangle = J_{i-1} - J_i. \quad (47)$$

در تقریب میدان متوسط داریم

$$\langle n_{i-1}n_i \rangle = \rho_{i-1}\rho_i. \quad (48)$$

در نتیجه معادله پیوستگی به شکل زیر در می آید:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = \rho_{i-1}(\rho_i - 1) - \rho_i(\rho_{i+1} - 1) = J_{i-1} - J_i. \quad (49)$$

اما می دانیم که در حالت پایا تغییرات زمانی چگالی می بایست برابر با صفر باشد و در نتیجه جریان در طول شبکه یکسان باشد. به این معنا که:

$$J_i = J = \rho_i(1 - \rho_{i+1}). \quad (50)$$

به این ترتیب اگر چگالی را در یک نقطه داشته باشیم مثلاً  $\rho_0$  می توانیم با استفاده مکرر از این، یعنی رابطه زیر

$$\rho_{i+1} = 1 - \frac{J}{\rho_i} \quad (51)$$



چگالی را در همه نقاط دیگر بر حسب  $\rho_0$  بدست آوریم. برای فهم بهتر این موضوع، معادله زیر را در نظر می گیریم:

$$f(x) = 1 - \frac{J}{x}. \quad (52)$$

$J$

داریم

$$f(0) = -\infty, \quad f(J) = 0, \quad f(\infty) = 1. \quad (53)$$

هم چنین

$$\frac{df}{dx} = 1 + \frac{J}{x^2} \geq 0. \quad (54)$$

وقتی که شبکه خیلی بزرگ است و تعداد جایگاه ها بی نهایت است (یعنی در حد ترمودینامیک) با تقریب خوبی می توانیم بگوییم که  $\rho_{i+1} \approx \rho_i$ . در نتیجه در جستجوی این هستیم که آیا رابطه

$$f(x) = x \quad \text{یا} \quad 1 - \frac{J}{x} = x \quad (55)$$

جوابی دارد یا نه. معادله اخیر پاسخ اش این است:

$$x = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 4J}}{2}, \quad (56)$$

که نشان می دهد اگر  $J < \frac{1}{4}$  باشد، دو جواب برای  $x$  وجود دارد:

$$x_1 = \frac{1 - \sqrt{1 - 4J}}{2} \quad x_2 = \frac{1 + \sqrt{1 - 4J}}{2}, \quad J < \frac{1}{4}. \quad (57)$$

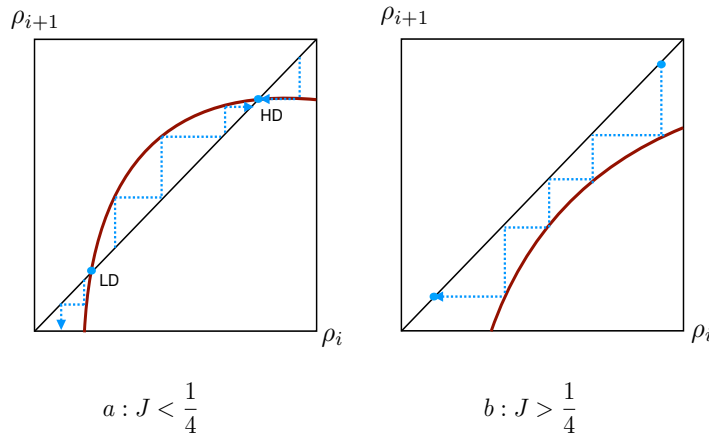
جواب  $\rho = x_1$  نشان دهنده چگالی کم و جواب  $\rho = x_2$  نشان دهنده چگالی زیاد است.

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۸) با توجه به آنالیز فوق و اینکه در مرزهای چپ و راست جریان به ترتیب برابر است با

$J = \alpha$  و  $J = 1 - \beta$ ، شمای تقریبی طرح چگالی را در روی یک شبکه یک بعدی در حالت های زیر بردست آورید:

یک - وقتی که  $J < \frac{1}{4}$  است،

ب- وقتی که  $J > \frac{1}{4}$  است.



شکل ۷: روش دیاگراماتیک برای حل معادله (۵۱). دیاگرام سمت چپ: وقتی که  $J < \frac{1}{4}$  است.  $J$ .

## ۴ حل دقیق فرآیند پخش و واکنش

آنچه که در بخش قبل با استفاده از روش تقریب میدان متوسط بدست آوردیم براستی که خیلی بیش از انتظار اولیه مان بود، چرا که قبلا دیده بودیم روش میدان متوسط در پیش بینی گذار فاز برای مدل های یک بعدی در مکانیک آماری تعادلی به راه خطا می رود. دلیل اش هم این بود که تعداد همسایگان یک ذره در یک بعد خیلی کم است و طبیعی است که تقریب میدان متوسط قادر به توصیف دقیق فازهای یک سیستم یک بعدی نیست. بنابراین به خودی خود خیلی جالب است که در یک بعد تقریب میدان متوسط نتیجه خوبی به دست می دهد. شاید بتواند دلیل اش را با کمی فکر کردن فهمید. در این فرآیند اگر یک ذره در بین راه متوقف شود، تمام ذرات پشت سر آن متوقف می شوند و در نتیجه یک رفتار پیدا می کنند. شاید به همین دلیل است که می توان از تقریب  $\langle n_i n_j \rangle = \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle$  یعنی تقریب میدان متوسط استفاده کرد. از طرفی همین مثال نشان دهنده یک نوع همبستگی بلند برد در یک بعد است (وقتی که یک اتومبیل سرعت اش را کم می کند تا چند ده متر پشت سر او اتومبیل ها سرعتشان را کم می کنند)، که در تقریب میدان متوسط کاملا نادیده گرفته می شود. بنابراین باید این انتظار را هم داشته باشیم که تقریب میدان متوسط از پس محاسبه جزئیات این فرآیند بر نیاید. برای محاسبه این جزئیات و برای پیدا کردن تصویری دقیق و کامل می خواهیم سعی کنیم یک راه حل دقیق از این فرآیند بدست آوریم. برای این کار از صورت بندی اپراتوری برای حل این مسئله استفاده می کنیم. داریم:

$$\frac{d}{dt}|P\rangle = -H|P\rangle, \quad (58)$$

که در آن  $H$  هامیلتونی ای است که تحول کاتوره ای این فرایند را توصیف می کند. حالت پایا در معادله

$$H|P\rangle = 0$$

صدق می کند. اگر وجود یک ذره را با 1 و غیبت یک ذره را با 0 نشان دهیم هر جایگاه از این شبکه  $N$  تایی دو حالت دارد و کلیه حالت های ممکن برای این فرایند در طول شبکه فوق یک فضای برداری  $2^N$  بعدی تشکیل می دهد که بردارهای پایه اش عبارتند از:

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle \quad n_i = 0, 1. \quad (59)$$

در این فضای برداری حالت های هر جایگاه به شکل زیر هستند:

$$|0\rangle = \text{empty site} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \text{filled site} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (60)$$

هم چنین عملگر های زیر را تعریف می کنیم که شمارنده جای پر و جای خالی اند:

$$\hat{n} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad 1 - \hat{n} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (61)$$

که در روابط زیر صدق می کنند:

$$\hat{n}|0\rangle = 0 \quad \hat{n}|1\rangle = |1\rangle. \quad (62)$$

هم چنین عملگر های خلق و فنا ی زیر را می توانیم تعریف کنیم:

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (63)$$

که در روابط زیر صدق می کنند:

$$\sigma^+|0\rangle = |1\rangle \quad \sigma^+|1\rangle = 0 \quad \sigma^-|0\rangle = 0 \quad \sigma^-|1\rangle = |0\rangle. \quad (64)$$

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۹) نشان دهید که هامیلتونی موضعی یعنی هامیلتونی ای که بین دو جایگاه مجاور عمل می کند به شکل زیر است: (راهنمایی: نخست شکل ماتریسی این هامیلتونی را با استفاده از فرایندهای موضعی بنویسید و سپس آن را به شکل یک اپراتور بنویسید.)

$$h = -\sigma^- \otimes \sigma^+ + \hat{n} \otimes (1 - \hat{n}). \quad (65)$$

به این ترتیب هامیلتونی درون شبکه (بدون در نظر گرفتن مرزها) برابر است با:

$$H_{bulk} = \sum_{i=1}^{N-1} -\sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ + \hat{n}_i(1 - \hat{n}_{i+1}). \quad (66)$$

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۹): نشان دهید که هامیلتونی های مربوط به مرزهای چپ و راست به ترتیب عبارت اند از: (رهنمایی: خست شکل ماتریسی این هامیلتونی را با استفاده از فرایندهای موضعی بنویسید و سپس آن را به شکل یک اپراتور بنویسید.)

$$h_L := -\alpha(\sigma_1^+ - (1 - \hat{n}_1)) \quad h_R := -\beta(\sigma_N^- - \hat{n}_N) \quad (67)$$

به این ترتیب هامیلتونی کل این فرایند در طول شبکه و در مرزها به شکل زیر نوشته می شود:

$$H = -\alpha(\sigma_1^+ - (1 - \hat{n}_1)) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} [-\sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ + \hat{n}_i(1 - \hat{n}_{i+1})] - \beta(\sigma_N^- - \hat{n}_N). \quad (68)$$

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۹): برای سادگی شبکه ای در نظر بگیرید که فقط دو جایگاه دارد. حالت پایای این سیستم را بدست آورید. چگالی را در جایگاه اول و دوم بدست آورید. جریان ذرات را در حالت پایا حساب کنید.

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۹): برای سادگی شبکه ای در نظر بگیرید که فقط سه جایگاه دارد. حالت پایای این سیستم را بدست آورید. چگالی را در جایگاه اول و دوم و سوم بدست آورید. جریان ذرات را در حالت پایا حساب کنید.

حال سوال اصلی ما یعنی پیدا کردن حالت پایای این فرایند تبدیل می شود به یافتن حالت پایه این هامیلتونی. برای پیدا کردن حالت پایه این هامیلتونی می توان روش های متفاوتی را به کار برد. مثلاً روش هایی مثل حل عددی برای شبکه های کوچک. دلیل کوچک بودن شبکه هم این است که بعد هامیلتونی برای این شبکه ها کم خواهد بود. اما برای پیش بینی دقیق فازهای این فرایند می بایست شبکه هایی را در نظر بگیریم که تعداد نقاط آنها دلخواه است و سپس تعداد نقاط (تعداد جایگاه ها) را به سمت بی نهایت ببریم. این کار احتیاج به حل دقیق دارد. حل دقیق هم کار پیچیده و پرزحمتی است که در مقالات متعدد به آن پرداخته شده. یک مقاله مروری در این مورد مقاله زیر است:

[1]: R A Blythe and M R Evans, Nonequilibrium steady states of matrix-product form: a solver's guide,

<https://arxiv.org/pdf/0706.1678.pdf>.

در ادامه درس به اختصار به این موضوع می پردازیم.

چنانکه گفتیم حل دقیق فرایند فوق ممکن است در نگاه اول پر زحمت به نظر برسد ولی ولی به زحمت اش می ارزد چرا که در مسیر این حل دقیق با تکنیک ها و شیوه های کاملاً نوینی آشنا خواهیم شد. شیوه ای که برای حل این مسئله پی می گیریم روش ضرب ماتریسی<sup>۹</sup> نام دارد. به طور کلی این روش هم برای فرایندهای استوکاستیک به کار می رود و با تغییراتی بنیادی و مفهومی برای یافتن حالت پایه سیستم های بس ذره ای نیز مورد استفاده واقع شده است. دامنه این کاربردها نیز گسترده است و ر سالهای اخیر این موضوع به شدت مورد تحقیق و بررسی قرار گرفته و چندین هزار مقاله در باره آن نوشته شده است.

دانشجوی علاقمند می تواند با جستجوی کلمات کلیدی ضرب ماتریسی با مقالات این موضوع آشنا شود. هدف ما در فرایندهای پخش و واکنش این است که حالت پایه یک هامیلتونی غیر هرمیتی ولی حقیقی را پیدا کنیم، یعنی حالت  $|P\rangle$  را در معادله زیر

$$H|P\rangle = 0. \quad (۶۹)$$

این هامیلتونی نیز در یک فضای بس ذره ای تعریف شده است و می توان حالت  $|P\rangle$  را به صورت زیر نوشت:

$$|P\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} P_{n_1, n_2, \dots, n_N} |n_1, n_2, \dots, n_N\rangle. \quad (۷۰)$$

فرمالیزم ضرب ماتریسی که گاهی اوقات به آن نهاده ضرب ماتریسی<sup>۱۰</sup> نیز گفته می شود با این فرض یا نهاده<sup>۱۱</sup> شروع می شود که ضرایب حالت پایه را به صورت زیر می نویسیم:

$$P_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \frac{1}{Z} \langle W | A_{n_1} A_{n_2} A_{n_3} \dots A_{n_N} | V \rangle, \quad (۷۱)$$

که در آن  $n = 0, 1$  دو ماتریس و  $|V\rangle$  و  $\langle W|$  دو بردار هستند و  $Z$  یک ضریب بهنجارش است. بعد این ماتریس ها و بردارها در روش حل تعیین خواهند شد. بعنوان مثال اگر  $N = 2$  باشد خواهیم داشت:

$$P_{00} = \frac{1}{Z} \langle W | A_0 A_0 | V \rangle, \quad P_{01} = \frac{1}{Z} \langle W | A_0 A_1 | V \rangle, \quad P_{10} = \frac{1}{Z} \langle W | A_1 A_0 | V \rangle, \quad P_{11} = \frac{1}{Z} \langle W | A_1 A_1 | V \rangle. \quad (۷۲)$$

---

Matrix Product Formalism<sup>۹</sup>  
Matrix Product Ansatz<sup>۱۰</sup>  
Ansatz<sup>۱۱</sup>

این مثال نشان می دهد که می توان این نهاده را به شکل فشرده تری نیز نوشت:

$$|P\rangle = \begin{pmatrix} P_{00} \\ P_{01} \\ P_{10} \\ P_{11} \end{pmatrix} = \frac{1}{Z} \langle W | \begin{pmatrix} A_0 A_0 \\ A_0 A_1 \\ A_1 A_0 \\ A_1 A_1 \end{pmatrix} |V\rangle = \frac{1}{Z} \langle W | \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \end{pmatrix} |V\rangle. \quad (73)$$

به این ترتیب در حالت کلی می توان نوشت:

$$|P\rangle = \frac{1}{Z} \langle W | \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots \mathcal{A} |V\rangle, \quad (74)$$

که در آن

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \end{pmatrix} \quad (75)$$

یک بردار دو بعدی است که عناصر آن هر کدام یک ماتریس است<sup>۱۲</sup>. حال هدف ما این است که معادله (۶۹) را حل کنیم یعنی معادله ای به شکل زیر را:

$$(h_1 + h_{12} + h_{23} + \dots h_{N-1,N} + h_N) |P\rangle = 0, \quad (76)$$

که با توجه به نهاده ای که برای حالت پایه فرض کرده ایم

$$(h_L + h_{12} + h_{23} + \dots h_{N-1,N} + h_N) \langle W | \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots \mathcal{A} |V\rangle = 0. \quad (77)$$

تا کنون هیچ شرطی روی بردارهای  $\mathcal{A}$  یا ماتریس های  $A_0, A_1$  نگذاشته ایم. حال تقاضا می کنیم که این ماتریس ها در شرط زیر صدق کنند

$$h(\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}) = \mathcal{X} \otimes \mathcal{A} - \mathcal{A} \otimes \mathcal{X}. \quad (78)$$

که در آن  $\mathcal{X}$  یک بردار با درایه های ماتریسی است و به صورت زیر نشان داده می شود. این درایه ها می بایست بعدا پیدا شوند.

$$\mathcal{X} = \begin{pmatrix} X_0 \\ X_1 \end{pmatrix} \quad (79)$$

---

Matrix-Valued-Matrix<sup>۱۲</sup>

نکته مهم این است که اگر رابطه (۷۸) برقرار باشد همه جملات میانی در این مسئله بس ذره ای حذف خواهند شد. اثر هامیلتونی میانی<sup>۱۳</sup> به صورت زیر محاسبه می شود.

$$\begin{aligned}
 & (h_{12} + h_{23} + h_{34} + \dots) \langle W | \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots | V \rangle \\
 &= \langle W | (\mathcal{X} \otimes \mathcal{A} - \mathcal{A} \otimes \mathcal{X}) \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots | V \rangle \\
 &+ \langle W | \mathcal{A} \otimes (\mathcal{X} \otimes \mathcal{A} - \mathcal{A} \otimes \mathcal{X}) \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots | V \rangle \\
 &+ \langle W | \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes (\mathcal{X} \otimes \mathcal{A} - \mathcal{A} \otimes \mathcal{X}) \otimes \dots | V \rangle \\
 &= \langle W | \mathcal{X} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots | V \rangle - \langle W | \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots \mathcal{X} | V \rangle. \tag{۸۰}
 \end{aligned}$$

اثرات هامیلتونی مرزی نیز به صورت زیر خواهد بود:

$$\begin{aligned}
 (h_L + h_R) \langle W | \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots | V \rangle &= \langle W | (h_L \mathcal{A}) \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots | V \rangle \\
 &+ \langle W | \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \mathcal{A} \otimes \dots \otimes (h_R \mathcal{A}) | V \rangle. \tag{۸۱}
 \end{aligned}$$

به این ترتیب پی می بریم که حل معادله (۶۹) تبدیل خواهد شد به مسئله یافتن ماتریس های  $A_0, A_1$  و بردارهای  $\langle W |$  و  $|V\rangle$  آنچنان که روابط زیر برقرار باشند:

$$\langle W | (h_L \mathcal{A} + \mathcal{X}) = 0 \quad (h_R \mathcal{A} - \mathcal{X}) | V \rangle = 0 \quad h(\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}) = \mathcal{X} \otimes \mathcal{A} - \mathcal{A} \otimes \mathcal{X}. \tag{۸۲}$$

فرمالیسمی که توضیح دادیم برای هر نوع فرایند استوکاستیک سودمند است. این فرمالیسم یک مسئله بس ذره ای را تبدیل می کند به حل روابط جبری (۸۲) که به مراتب ساده ترند. اما یک شمارش ساده از تعداد درجات آزادی ای که در مسئله بس ذره ای وجود دارد و نحوه مقیاس آنها با  $N$  یعنی اندازه شبکه نشان می دهد که هر مسئله ای را نمی توان به این طریق حل کرد. در بعضی از موارد این نهاده ضرب ماتریسی تنها به حل تقریبی می انجامد و راه را برای جستجوی حل عددی هموار می کند و در بعضی از موارد نیز به حل دقیق می انجامد. فرایند کاملاً نامتقارن پخش و واکنش از آن فرایندهایی است که در این چارچوب حل دقیق دارد. برای این کار نخست به فرم ماتریسی هامیلتونی بین دو جایگاه نگاه می کنیم.

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ۱۳۹۹) الف: از رابطه های (۶۵) و (۸۲) و با تغییر نام

$$A_0 = D, \quad A_1 = E \tag{۸۳}$$

<sup>۱۳</sup> Bulk Hamiltonian

بدست آورید که:

$$[X_0, D] = 0 \quad [X_1, E] = 0, \quad X_0 D - X_1 E = DE. \quad (۸۴)$$

ب: از همان رابطه ها بدست آورید که

$$\langle W | \begin{pmatrix} -\alpha E + X_0 \\ \alpha E + X_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta D - X_0 \\ -\beta D - X_1 \end{pmatrix} | V \rangle = 0. \quad (۸۵)$$

پ: از آنجا که  $\mathcal{N}$  می تواند به دلخواه انتخاب شود (تا جاییکه به سازگاری روابط لطمه نزند) نشان دهید که با انتخاب مناسب می توان روابط نهایی را به شکل زیر در آورد:

$$DE = D + E \quad D|V\rangle = \frac{1}{\beta}|V\rangle \quad \langle W|E = \frac{1}{\alpha}\langle W|. \quad (۸۶)$$

بنابراین مسئله پیدا کردن حالت پایای این فرایند تبدیل می شود به یافتن حلی از معادلات فوق.

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۹)

نشان دهید که ضریب بهنجارش  $Z$  برابر است با

$$Z = \langle W | C^N | V \rangle \quad (۸۷)$$

که در آن  $C = D + E$ .

در اینجا نیز  $Z$  را تابع پارش می خوانیم چرا که کمیت های مهم فیزیکی از این تابع استخراج می شوند. از نظر فنی هم این تابع همان کمیتی است که احتمالات را بهنجار می کند، به همین دلیل این نامگذاری کاملاً موجه است.

در فرمالیزم ضرب ماتریسی می توان توابع همبستگی را نیز براحتی محاسبه کرد. به عنوان مثال فرض کنید می خواهیم متوسط چگالی را در نقطه  $k$  ام از شبکه پیدا کنیم. در این صورت می نویسیم:

$$\langle n_k \rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} n_k \psi_{n_1, n_2, \dots, n_N}$$



$$= \sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} n_k \frac{1}{Z} \langle W | A_{n_1} A_{n_2} \dots A_{n_N} | V \rangle. \quad (88)$$

حال از این نکته استفاده می کنیم که:

$$\sum_n A_n = D + E = C, \quad \sum_n n A_n = D \quad (89)$$

و در نتیجه

$$\langle n_k \rangle = \frac{\langle W | C^{k-1} D C^{N-k} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle}. \quad (90)$$

■ تمرین: نشان دهید که

$$\langle J_k \rangle = \langle N_k (1 - n_{k+1}) \rangle = \frac{\langle W | C^{N-1} | V \rangle}{\langle W | C^N | V \rangle}. \quad (91)$$

قبل از ادامه این راه حل بهتر است کمی توقف کنیم و به کاربرد روش ضرب ماتریسی در شرایط مرزی پرئودیک بپردازیم. در این شرایط که شبکه دیگر ابتدایی و انتهایی ندارد نگاه ضرب ماتریسی چنین شکلی به خود می گیرد:

$$P_{n_1, n_2, \dots, n_N} = \frac{1}{Z} \text{Tr}(A_{n_1} A_{n_2} \dots A_{n_N}). \quad (92)$$

که در آن  $Z = \text{Tr}(C^N)$ . در این شرایط از سه معادله (82) فقط معادله زیر باقی می ماند

$$DE = D + E. \quad (93)$$

این معادله توسط ماتریس های یک بعدی یعنی توسط اعداد حل می شود. این اعداد را با  $d$  و  $e$  نشان می دهیم. در نتیجه کافی است که رابطه این دو عدد به شکل زیر باشد:

$$de = d + e \quad \rightarrow \quad d = \frac{e}{d + e}. \quad (94)$$

از آنجا که در شرایط مرزی پرئودیک ذره ای به سیستم وارد و از آن خارج نمی شود، تعداد ذرات در شبکه ثابت است. هم چنین از آنجا که اعداد برخلاف ماتریس ها با هم جابجا می شوند، احتمال همه هیئت ها باهم برابر است. به عبارت بهتر مهم نیست که ذرات در کجای شبکه قرار گرفته باشند، در حالت پایا همه این حالت ها یک احتمال دارند. به عنوان مثال اگر  $N = 4$  و تعداد ذرات برابر با 2 باشد، آنگاه داریم:

$$P(1100) = P(1010) = P(1001) = P(0110) = P(0101) = P(0011) = \frac{1}{Z} d^2 e^2 \quad (95)$$

که در آن  $Z = (d + e)^4$ . با توجه به این که همه هیئت ها هم احتمال هستند می توان به راحتی احتمال هر کدام را بدست آورد. کافی است که تعداد کل هیئت ها را بدست آوریم. اگر تعداد نقاط شبکه  $N$  و تعداد ذرات  $M$  باشد، تعداد کل هیئت های ممکن برابر است با:  $\binom{N}{M}$  و در نتیجه احتمال هر هیئتی برابر است با:

$$P = \frac{1}{\binom{N}{M}}. \quad (96)$$

■ تمرین: موعد تحویل (۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۹). برای چنین سیستمی چگالی و جریان ذرات را در حالت پایا حساب کنید. هم چنین کمیت زیر را حساب کنید:

$$\langle n_k \cdots n_l \rangle \text{ یعنی همبستگی چگالی در دو نقطه از شبکه را.}$$

پس از این توقف کوتاه در شرایط مرزی پرودییک که دیدیم مسئله است که به سادگی حل می شود، به مسئله اولیه خود که شرایط مرزی باز دارد باز می گردیم. در این مسئله می بایست ماتریس ها و بردارهایی پیدا کنیم که در روابط زیر صدق کنند:

$$DE = D + E \quad D|V\rangle = \frac{1}{\alpha}|V\rangle \quad \langle W|E = \frac{1}{\beta}\langle W|. \quad (97)$$

مهمترین کمیتی که باید حساب کنیم تابع پارش یعنی

$$Z_N = \langle W|C^N|V\rangle = \langle W|(D + E)^N|V\rangle \quad (98)$$

است. این کار را به چند روش می توانیم انجام دهیم:

■ روش اول: جابجا کردن مستقیم ماتریس ها برای شبکه های کوچک.

برای  $N$  های کوچک مثلا برای  $N = 2$  داریم:

$$C = D + E \quad C^2 = D^2 + E^2 + DE + ED = D^2 + E^2 + ED + D + E \quad (99)$$

در نتیجه اگر بردارها را بهنجار کنیم به شکلی که  $\langle W|V\rangle = 1$  باشد، آنگاه با توجه به روابط (۹۷) خواهیم داشت:

$$Z_1 = \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} \quad Z_2 = \frac{1}{\alpha^2} + \frac{1}{\beta^2} + \frac{1}{\alpha\beta} + \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta}. \quad (100)$$

■ تمرین: موعده تحویل (۱۰ فروردین ماه ۱۳۹۹). برای  $N = 4$  به همین روش تابع پارش را حساب کنید و سپس از روی آن کمیت های زیر را حساب کنید:

$$\langle n_k \rangle \quad \text{for} \quad k = 1, 2, 3, 4 \quad \text{and} \quad J. \quad (1.01)$$

برای آنکه از این روش استفاده کنیم می بایست بتوانیم  $(D + E)^N$  را برای  $N$  دلخواه محاسبه کنیم.

■ تمرین: الف: یک عبارت ساده برای  $D^n E$  بدست آورید.

ب: یک عبارت ساده برای  $DE^n$  بدست آورید.

بدست آوردن یک عبارت ساده برای  $(D + E)^N$  چندان ساده نیست. در این درس نیز روش بدست آوردن آن را نخواهیم گفت. اما جوابش این است:

$$(D + E)^N = \sum_{p=0}^N \frac{p(2N - p - 1)!}{N!(N - p)!} \sum_{q=0}^p E^q D^{p-q} \quad (1.02)$$

■ تمرین: با توجه به رابطه بالا تابع پارش را برای یک شبکه با اندازه دلخواه حساب کنید.

■ روش دوم: قطری کردن ماتریس  $C$ .

در این روش ماتریس  $C$  را بدست می آوریم و سپس آن را قطری کرده و به توان می رسانیم و سپس تابع پارش را محاسبه می کنیم. نخست نشان می دهیم که جبر (۹۷) تنها می تواند دو نوع نمایش داشته باشد. یک نمایش یک بعدی که همانی است که قبلا معرفی کردیم که در آن ماتریس ها با اعداد نشان داده می شوند و دیگری یک نمایش بی نهایت بعدی. به بیان دیگر این جبر هیچ نمایشی با بعد محدود به جز نمایش یک بعدی ندارد. برای این کار ماتریس های جدیدی به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$D = I + D', \quad E = I + E'. \quad (1.03)$$

با توجه به جبر (۹۷) بدست می آوریم:

$$D'E' = I, \quad D'|V\rangle = \left(\frac{1}{\beta} - 1\right)|V\rangle, \quad \langle W|E' = \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)\langle W|. \quad (1.04)$$

اگر بعد ماتریس ها محدود باشد از رابطه  $D'E' = I$  نتیجه می گیریم که این ماتریس ها وارون پذیرند، چون دترمینان آنها غیر صفر است. با قراردادن  $D' = E'^{-1}$  معلوم می شود که

$$D'E' = E'D'$$

و از آنجا

$$\langle W|V \rangle = \langle W|D'E'|V \rangle = \langle W|E'D'|V \rangle = \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)\left(\frac{1}{\beta} - 1\right)\langle W|V \rangle \quad (105)$$

و در نتیجه

$$\left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)\left(\frac{1}{\beta} - 1\right) = 1 \quad \longrightarrow \quad \alpha + \beta = 1. \quad (106)$$

این نتیجه به این معناست که نمایش یک بعدی فقط وقتی یک جواب است که قید فوق روی پارامترهای  $\alpha$  و  $\beta$  وجود داشته باشد. به عبارت بهتر در دیاگرام فاز این مدل روی این خط حالت پایا حالتی است که از نمایش یک بعدی جبر (۹۷) بدست می آید. باید به خاطر داشته باشیم که از رابطه  $D'E' = I$  تنها در بعد متناهی می توان نتیجه گرفت که این دو ماتریس وارون پذیرند. در بعد بی نهایت چنین نتیجه ای نمی توان گرفت. در واقع در فضای بی نهایت بعدی یک راه حل این است:

$$D' = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n+1| \quad E' = \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n|. \quad (107)$$

■ تمرین:  $D'E'$  و  $E'D'$  را حساب کنید و نشان دهید که با هم مساوی نیستند.

حال باید بردارهای  $|V\rangle$  و  $|W\rangle$  را تعیین کنیم.

■ تمرین: قرار می دهیم

$$|V\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} v_n |n\rangle \quad (108)$$

و

$$\langle W| = \sum_{n=0}^{\infty} w_n \langle n|. \quad (109)$$

الف: نشان دهید که با توجه به حلی که برای  $D$  و  $E$  پیدا کردیم، روابط زیر برقرارند:

$$v_n = \left(\frac{1}{\beta} - 1\right)^n v_0, \quad w_n = \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)^n w_0. \quad (110)$$

ب: نشان دهید برای اینکه  $\langle W|V \rangle = 1$  باشد، باید داشته باشیم:

$$v_0 = w_0 = \sqrt{\frac{\alpha + \beta + 1}{\alpha\beta}}. \quad (111)$$

این ثابت را برای استفاده های بعدی با  $\kappa$  نشان می دهیم:

$$\kappa := \sqrt{\frac{\alpha + \beta + 1}{\alpha\beta}} \quad (112)$$

حال می توانیم تابع پارش را محاسبه کنیم، می دانیم که

$$Z_N = \langle W|C^N|V \rangle.$$

ماتریس  $C$  نیز شکل زیر را دارد:

$$C = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & \\ 1 & 2 & 1 & & \\ & 1 & 2 & 1 & \\ & & 1 & 2 & 1 \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (113)$$

■ تمرین: (موعد تحویل: ۱۰ فروردین ۱۳۹۹)

نشان دهید که ویژه مقدارها و ویژه بردارهای این ماتریس به شکل زیر هستند:

$$C|e_\theta\rangle = 2(1 + \cos\theta)|e_\theta\rangle \quad (114)$$

که در آن

$$|e_\theta\rangle = \frac{1}{\sin \theta} \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \sin 2\theta \\ \sin 3\theta \\ \sin 4\theta \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \quad (115)$$

که در آن  $\theta \in [0, 2\pi]$  راهنمایی: یک ویژه بردار مثل

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

را در نظر بگیرید. معادله ویژه برداری  $C|x\rangle = \lambda|x\rangle$  منجر به روابط زیر می شود:

$$x_{n-1} + 2x_n + x_{n+1} = \lambda x_n \quad (116)$$

این معادله را با شرایط مرزی  $x_{-1} = 0$  حل کنید و تقاضا کنید که درایه های ویژه برداری که به دست می آورید محدود باقی بمانند.

■ تمرین: نشان دهید که

$$\langle W|e_\theta\rangle = \frac{\kappa a}{1 + a^2 - 2a \cos \theta} \quad (117)$$

که در آن

$$a = \frac{1}{\alpha} - 1.$$

هم چنین نشان دهید که

$$\langle e_\theta | V \rangle = \frac{\kappa b}{1 + b^2 - 2b \cos \theta}. \quad (118)$$

نهایتاً به یک رابطه کامل بودن ویژه بردارهای ماتریس  $C$  نیاز داریم که به صورت زیر است:

■ **قضیه:** رابطه کامل بودن زیر برقرار است:

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta |e_\theta\rangle \langle e_\theta| = I. \quad (119)$$

**اثبات:** با توجه به تعریف ویژه حالت ها طرف چپ تساوی بالا را بسط می دهیم: طرف چپ برابر است با:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sin(n+1)\theta \sin(m+1)\theta |m\rangle \langle n| d\theta \\ = & \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2} [\cos(n-m)\theta - \cos(m+n-2)\theta] |m\rangle \langle n| d\theta \\ = & \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2} [2\pi \delta_{n,m}] |m\rangle \langle n| = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = I. \end{aligned} \quad (120)$$

به این ترتیب تابع پارش به صورت یک انتگرال در می آید:

$$\begin{aligned} Z_N &= \langle W | C^N | V \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \langle W | C^N | e_\theta \rangle \langle e_\theta | V \rangle \sin^2 \theta d\theta \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \langle W | e_\theta \rangle \langle e_\theta | V \rangle (1 + \cos \theta)^N 2^N \sin^2 \theta \\ &= \frac{2^N}{\pi} \kappa^2 ab \int_0^{2\pi} \frac{(1 + \cos \theta)^N \sin^2 \theta}{(1 + a^2 - 2a \cos \theta)(1 + b^2 - 2b \cos \theta)} d\theta. \end{aligned} \quad (121)$$

با به یادآوردن اینکه

$$\kappa^2 = \frac{\alpha + \beta + 1}{\alpha\beta}, \quad a = \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right) \quad b = \left(\frac{1}{\beta} - 1\right)$$

شکل نهایی تابع پارش بر حسب پارامترهای فرایند پخش و واکنش عبارت است از:

$$Z_N(\alpha, \beta) = \frac{2^N (1 - \alpha)(1 - \beta)(\alpha + \beta + 1)}{\pi \alpha^2 \beta^2} \int_0^{2\pi} \frac{(1 + \cos \theta)^N \sin^2 \theta}{(1 + a^2 - 2a \cos \theta)(1 + b^2 - 2b \cos \theta)} d\theta. \quad (122)$$

به این ترتیب محاسبه تابع پارش یک مسئله بس ذره ای پیچیده تبدیل شده است به محاسبه انتگرال یک تابع یک متغیره. این تابع در نگاه اول ممکن است تابع ساده ای نباشد ولی نسبت به مسئله اولیه یعنی مسئله بس ذره ای به غایت ساده است. به روش های مختلف می توان این انتگرال

را محاسبه کرد. به خصوص توجه به این نکته مهم است که ما علاقمند به رفتار این انتگرال در حد  $N \rightarrow \infty$  هستیم و در این حد می توان از تقریب نقطه زینی استفاده کرد و رفتار انتگرال را مطالعه کرد. در این حد تابع پارش را با  $Z_\infty(\alpha, \beta)$  نشان می دهیم. می توان با استفاده از این عبارت کلیه کمیت های ترمودینامیکی نظیر جریان و هم چنین طرح چگالی را حساب کرد. بستگی غیر تحلیلی این کمیت ها به  $\alpha$  و  $\beta$  دیاگرام فاز این فرایند را به طور دقیق تعیین خواهد کرد. ما این محاسبات را انجام نخواهیم داد. خواننده علاقمند می تواند با مراجعه به مقالات تخصصی این موضوع را کامل کند.