Weierstraß-Institut für
Angewandte Analysis und Stochastik

Leibniz
Gemeinschaft

Wird ein Gigant erscheinen oder nicht?

Mikro-Makro-Phasenübergänge in der Wahrscheinlichkeitstheorie

Wolfgang König (WIAS Berlin und TU Berlin)

- Wir betrachten Systeme, die aus vielen mikroskopisch kleinen zufälligen Objekten bestehen (z.B. Partikel, Kanten zwischen je zwei Punkten, Schlingen, ...)
- Diese Objekte haben lokale mikroskopische Beziehungen mit einander (Verbundenheit, Zusammenhangskomponenten, Wegstücke, ...).
- Die Anzahl N ist sehr groß, und Effekte zeigen sich nur im Grenzwert $N \to \infty$.
- Es gibt einen gewissen Wachstumsparameter, meist die Wahrscheinlichkeit, mit der die Objekte oder die Beziehungen existieren.
- Die vielen kleinen Dinge können plötzlich auch makroskopische Eigenschaften herausbilden, wenn der Parameter eine gewissen Schwellenwert überschreitet.
- Die Fragen sind, was diese makroskopischen Eigenschaften sind und ob dieser Schwellenwert endlich ist und ob er positiv ist. Es schließen sich viele Fragen an.
- Der Wahrscheinlichkeitstheoretiker (aber der Physiker oft nicht) spricht dann oft von einem Phasenübergang, hier konkreter von einem Mikro-Makro-Phasenübergang. Einige davon sind berühmt und der Ausgangspunkt für eine riesige Menge an Forschungsarbeit.

(I) ZUFÄLLIGER GRAPH MIT N KNOTEN

- Zufälliger Graph auf N Knoten
- Frage nach Größe der größten Komponente: wie wächst sie mit N?
- Im Jahre 1960 total überraschend, aber heute gut bekannt.
- Anwendungen in Informatik und Kombinatorik, aber mathematisches Hauptinteresse wegen des hübschen Phasenübergangs.

Der Erdős–Rényi-Graph $G(N, p)$

- Eckenmenge $[N] = \{1, 2, \dots, N\}$
- Jede Kante $\{i, j\}$ mit $i, j \in [N]$, $i \neq j$, existiert mit Wahrscheinlichkeit $p \in (0, 1)$.
- Die Existenz der Kanten ist unabhängig.

Frage: Wie groß ist die größte Komponente von $G(N, p)$?

Der Erdős–Rényi-Graph $G(N,p)$

- Eckenmenge $[N] = \{1, 2, \dots, N\}$
- Jede Kante $\{i, j\}$ mit $i, j \in [N]$, $i \neq j$, existiert mit Wahrscheinlichkeit $p \in (0, 1)$.
- Die Existenz der Kanten ist unabhängig.

Frage: Wie groß ist die größte Komponente von $G(N,p)$?

Ein berühmter Phasenübergang:

[Erdős/Rényi 1960]

Wenn man $p = p_N = t/N$ wählt, dann gilt für große N mit Wahrscheinlichkeit $\to 1$:

- Falls $t < 1$, so ist die größte Komponente $\approx \log N$ groß,
- Falls $t > 1$, so ist sie $\sim K(t)N$ groß (mit einem bekannten $K(c) \in (0, \infty)$).

$\Longrightarrow$ Mikro-Makro-Phasenübergang bei $t = 1$: “Emergence of a giant cluster”.

- Die zweitgrößte Komponente ist $\approx \log N$ groß.
- Man kann sagen, dass alle Komponenten ab der zweiten mikroskopisch groß sind (also von Ordnung Eins). Nur der (einzige) Gigant ist makroskopisch groß (also von Ordnung N).
- Es gibt viele Beweise des Phasenübergangs; meist benutzt man eine Approximation mit einem Verzweigungsprozess.
- Einbettung in einen zeitabhängigen Prozess $(G(N, t/N))_{t\in[0,\infty)}$, den ER-Graphenprozess, möglich: Zum Zeitpunkt Eins erscheint der Gigant (im Limes $N \to \infty$). Diesen Zeitpunkt kann man Explosionszeitpunkt nennen. Anschließend wachsen alle Komponenten weiter, auch der Gigant.
- Man kann das Modell räumlich einbetten und erhält einen geometrischen Graphen bzw. einen inhomogenen ER-Graphen; da gibt es viele Varianten.
- Wenn man, statt eine Kante zu ziehen, die beiden Partikel mit einander koagulieren lässt (also aus zwei Partikeln eines mit summierter Masse bildet, das zwischen den beiden Partikeln platziert wird), dann erhält man einen Partikelprozess mit Koagulation. Bei geeigneter Wahl der Koagulationswahrscheinlichkeiten ist der ER-Prozess ein Teil davon.

- Hineinzoomen in $t \approx 1$: Phasenübergänge auf anderen Skalen!
- Beschreibung der Größen aller Komponenten (meist mit Hilfe von Verzweigungsprozessen als Approximation oder mit Kombinatorik)
- Kombinatorische Untersuchungen weiterer Größen, z.B. die Anzahl der Kanten im Giganten, Durchmesser des Giganten, Wahrscheinlichkeit für das Entstehen zweier Giganten, ...
- Untersuchungen des räumlichen bzw. des zeitlichen Prozesses.
- Erweiterungen des Modells, z.B. Kanten mit unterschiedlichen Farben und Wahrscheinlichkeiten, dann Cluster mit gegebenen Farbkombinationen zählen.

(II) PERKOLATION

- Zufälliger Graph im unendlichen d-dimensionalen Raum
- Frage nach Unendlichkeit der größten Komponente
- Völlig neue eingeführt in den 1960ern; heute ein Standardmodel der W'Theorie
- Anwendungen in Materialwissenschaft oder Telekommunikation, aber Hauptinteresse wegen mathematischer Schönheit ($\Longrightarrow$ stochastische Geometrie).

Perkolation auf $\mathbb{Z}^d$

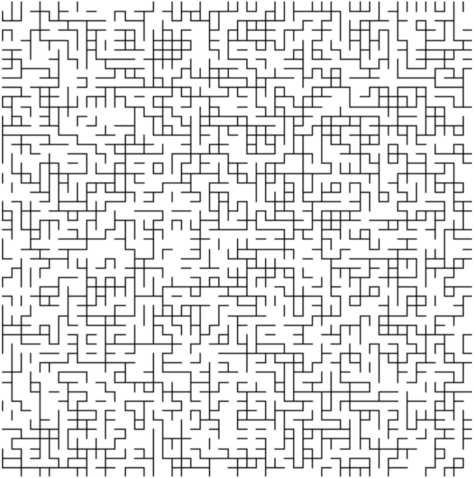
- Jede Kante zwischen nächsten Nachbarn im $\mathbb{Z}^d$ ist mit Wahrscheinlichkeit $p \in (0,1)$ offen und sonst geschlossen.
- Die Offenheit der Kanten ist unabhängig.

Poröser Stein: Wasser fließt durch den $\mathbb{Z}^d$ nur entlang offener Kanten. Im Ursprung ist eine Wasserquelle. Der Stein ist $[-N, N]^d \cap \mathbb{Z}^d$. Wird die Oberfläche des Steins nass? (d.h. an mindestens einem Punkt?).

Perkolation auf $\mathbb{R}^d$

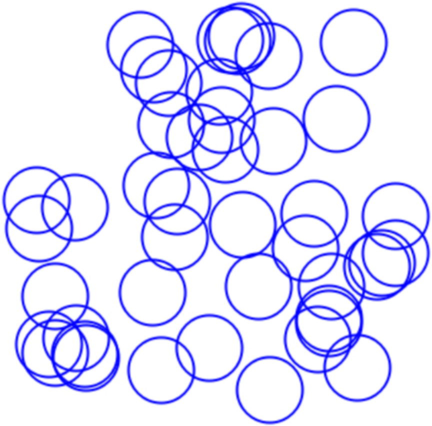
- Sei $(X_i)_{i \in I}$ eine zufällige, homogene Punktwolke im $\mathbb{R}^d$, ein Poisson'scher Punktprozess.
- Je zwei Punkte X_i und X_j mit $|X_i - X_j| \leq 2R$ werden durch eine Kante verbunden.
- Die Vereinigung der R-Kugeln um die X_i heißt das Boole'sche Modell.

Telekommunikation: Multihop-System, X_i = Basisstationen, Nachrichten springen Distanzen $\leq R$. Kann man Nachrichten unendlich weit verbreiten?



50×50-Gitter mit $p = 0,51$

https://commons.wikimedia.org
/w/index.php?curid=655409



Kugeln um Poisson'sche Punkte mit Radius R, das Boole'sche Modell.
Mittelpunkte können verbunden werden, wenn die Kugeln sich schneiden.

Ein Perkolationsmodell (egal, ob diskret oder kontinuierlich) ist ein räumlich eingebetteter zufälliger Graph im $\mathbb{R}^d$ und hat daher auch eine größte Komponente $\mathcal{C}$.

Diskrete Perkolation: Beide Phasen existieren

In Dimension $d \geq 2$ existiert ein kritischer Schwellenwert $p_c \in (0,1)$, so dass fast sicher $\#\mathcal{C} < \infty$ ist, falls $p < p_c$ und fast sicher $\#\mathcal{C} = \infty$ ist, falls $p > p_c$.

- Der Wert von p_c ist nur in $d = 2$ bekannt mit $p_c = 1/2$.
- p_c ist genau der Wert, ab dem die Perkolationswahrscheinlichkeit $\theta(p) = \mathbb{P}($Die Komponente des Ursprungs ist unendlich groß$)$ positiv ist.
- Die beiden Beweise für $p_c > 0$ und $p_c < 1$ beruhen auf einer diskreten Abzählung aller Konturen, die die Komponente des Ursprungs umfassen (in $d = 2$). Dies geht mit Hilfe des Arguments von Rudolf Peierls.

- Poisson'scher Punktprozess $\mathbb{X} = (X_i)_{i\in I}$ mit Intensität $\lambda \in (0,\infty)$.
- Konnektivitätsradius $R \in (0,\infty)$. Boole'sches Modell: $Z_R = \bigcup_{i\in I} B_R(X_i)$.
- $\mathcal{C}(x)$ = Komponente Z_R, die x enhält.
- **Perkolations-Wahrscheinlichkeit** $\theta(\lambda, R) = \mathbb{P}(|\mathcal{C}(0)| = \infty)$.
- **Kritische Dichte** $\lambda_c(R) = \inf\{\lambda\colon \theta(\lambda, R) > 0\}$.
- Folgerung aus Peierls's Argument: $\lambda_c(R) \in (0,\infty)$.
- Numerischer Wert von $\lambda_c(R)$ und Stetigkeit von $\theta(\cdot, R)$ in $\lambda_c(R)$ **generell unbekannt!**

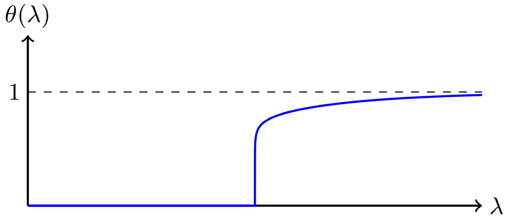


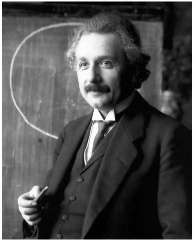
Abbildung: Approximatives Diagramm der Perkolations-Wahrscheinlichkeit

- "Sharp transition": Zeige, dass gewisse andere Phänomene genau bei $p = p_\mathrm{c}$ auftauchen, z.B. Existenz eines Weges vom linken bis zum rechten Rand der Box $[-N,N]^d \cap \mathbb{Z}^d$, oder dass die Ws., einen Weg vom Rand der r-Kugel bis zum Rand der $2r$-Kugel nicht verschwindet für $r \to \infty$.
- "chemischer Abstand": Wie lang ist der Weg innerhalb der gigantischen Komponente zwischen zwei weit entfernten Punkten?
- Telekom-Anwendungen: Lasse eine Familie von Nachrichtentrajektorien auf der größten Komponenten laufen und betrachte deren Interferenz und deren kürzeste Wege.

(III) Bose–Einstein-Kondensation

- Voraussage 1924 über einen neuen Aggregatzustand sehr geheimnisvoll
- Experimentelle Realisierung erst 1995 ($\Longrightarrow$ Nobelpreis 2001)
- Viele mathematische Forschungstätigkeit, besonders seit 2000, mit vielen Ergebnissen, aber Hauptproblem noch offen.

- Im Jahre 1924 bat der junge, damals weitgehend unbekannte Physiker SATYENDRA NATH BOSE den berühmten ALBERT EINSTEIN um Hilfe bei der Übersetzung und Veröffentlichung seiner neuesten Arbeit über Lichtquanten in der *Zeitschrift für Physik*.
- Einstein übersetzte das Manuskript ins Deutsche und sorgte für Publikation für Bose.
- Er betonte, dass diese neue Methode geeignet sei, die Quantenmechanik des idealen (= interaktionsfreien) Gases zu erklären. Er erweiterte die Idee auf Gasatome und sagte 1925 die Existenz eines neuen, bisher völlig unbekannten Zustands voraus, das nun unter dem Namen Bose–Einstein-Kondensat bekannt ist.



ALBERT EINSTEIN (1879-1955) in 1921

SATYENDRA NATH BOSE (1894-1974) im Jahre 1925

Jedes Partikel hat drei Attribute:

- eine kinetische Energie (in Form des Laplace-Operators Δ),
- eine (weiche oder harte) Falle (z.B. in einer Box Λ im $\mathbb{R}^d$),
- Interaktionen mit jedem anderen Partikel.

Jedes Partikel hat drei Attribute:

- eine kinetische Energie (in Form des Laplace-Operators Δ),
- eine (weiche oder harte) Falle (z.B. in einer Box Λ im $\mathbb{R}^d$),
- Interaktionen mit jedem anderen Partikel.

Man beschreibt das System mit Hilfe eines Hamilton-Operators für N Partikel an den Orten $x_1, \dots, x_N$ in einer Box $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ mit paarweiser Interaktion via ein Paarpotential $v\colon \mathbb{R}^d \to [0, \infty]$:

$$\mathcal{H}_N^{(\Lambda)} = -\sum_{i=1}^N \Delta_i + \sum_{1 \le i < j \le N} v\big(|x_i - x_j|\big), \qquad x_1, \dots, x_N \in \Lambda.$$

Jedes Partikel hat drei Attribute:

- eine kinetische Energie (in Form des Laplace-Operators Δ),
- eine (weiche oder harte) Falle (z.B. in einer Box Λ im $\mathbb{R}^d$),
- Interaktionen mit jedem anderen Partikel.

Man beschreibt das System mit Hilfe eines Hamilton-Operators für N Partikel an den Orten $x_1, \dots, x_N$ in einer Box $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ mit paarweiser Interaktion via ein Paarpotential $v\colon \mathbb{R}^d \to [0, \infty]$:

$$\mathcal{H}_N^{(\Lambda)} = -\sum_{i=1}^{N} \Delta_i + \sum_{1 \le i < j \le N} v\big(|x_i - x_j|\big), \qquad x_1, \dots, x_N \in \Lambda.$$

- $\mathcal{H}_N^{(\Lambda)}$ wird angewendet auf Wellenfunktionen $\phi\colon \Lambda^N \to \mathbb{R}$.
- $|\phi(x_1, \dots, x_N)|^2 =$ Dichte der Wahrscheinlichkeit für N Partikel an den Orten $x_1, \dots, x_N$.
- $|\phi(x_1, \dots, x_N)|^2$ is symmetrisch ($=$ permutationsinvariant).

Bosonen-System (Quantenmechanik!):

- Auch $\phi(x_1, \dots, x_N)$ ist symmetrisch.

- Hauptuntersuchungsobjekt:
  symmetrisierte Spur $\quad Z_N(\beta,\Lambda) = \mathrm{Tr}_+\big(\exp\{-\beta\mathcal{H}_N^{(\Lambda)}\}\big).$
- Physik $\Longleftrightarrow$ Mathematik:

Temperatur	$\Longleftrightarrow$	$1/\beta$
kinetische Energie	$\Longleftrightarrow$	$\mathrm{e}^{\beta\Delta}$ $\Longleftrightarrow$ Brown'sche Bewegung auf $[0,\beta]$
Interaktion	$\Longleftrightarrow$	$\mathrm{e}^{-v(x_i-x_j)}$
Mittelung über zufällige Teilchen	$\Longleftrightarrow$	Spur
Symmetrisierung	$\Longleftrightarrow$	zufällige Permutation

Positive Temperatur $1/\beta$

- Hauptuntersuchungsobjekt:
  symmetrisierte Spur $\qquad Z_N(\beta,\Lambda) = \mathrm{Tr}_+\big(\exp\{-\beta\mathcal{H}_N^{(\Lambda)}\}\big).$
- Physik $\Longleftrightarrow$ Mathematik:

$$\begin{array}{rcl} \text{Temperatur} & \Longleftrightarrow & 1/\beta \\ \text{kinetische Energie} & \Longleftrightarrow & \mathrm{e}^{\beta\Delta} \Longleftrightarrow \text{Brown'sche Bewegung auf } [0,\beta] \\ \text{Interaktion} & \Longleftrightarrow & \mathrm{e}^{-v(x_i-x_j)} \\ \text{Mittelung über zufällige Teilchen} & \Longleftrightarrow & \text{Spur} \\ \text{Symmetrisierung} & \Longleftrightarrow & \text{zufällige Permutation} \end{array}$$

- Feynman–Kac-Formel:

$$Z_N(\beta,\Lambda) = \underbrace{\int_\Lambda \mathrm{d}x_1 \cdots \int_\Lambda \mathrm{d}x_N}_{N \text{ Punkte in } \Lambda} \overbrace{\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}}^{\text{zufällige Permutation}} \underbrace{\bigotimes_{i=1}^N \mu^{(\beta)}_{x_i,x_{\sigma(i)}}}_{N \text{ Brown'sche Brücken}} \Big[\overbrace{\mathrm{e}^{-\sum_{1\le i<j\le N} V_\beta(B^{(i)},B^{(j)})}}^{\text{Interaktion}}\Big].$$

Positive Temperatur $1/\beta$

- Hauptuntersuchungsobjekt:
  symmetrisierte Spur $\qquad Z_N(\beta,\Lambda) = \mathrm{Tr}_+\big(\exp\{-\beta\mathcal{H}_N^{(\Lambda)}\}\big).$
- Physik $\Longleftrightarrow$ Mathematik:

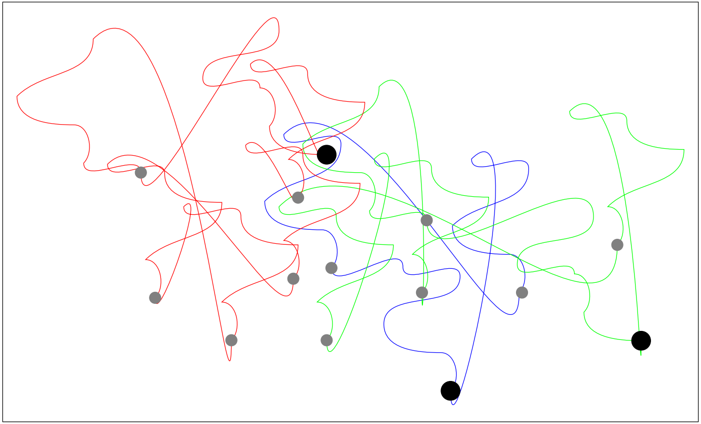
Temperatur	$\Longleftrightarrow$	$1/\beta$
kinetische Energie	$\Longleftrightarrow$	$\mathrm{e}^{\beta\Delta} \Longleftrightarrow$ Brown'sche Bewegung auf $[0,\beta]$
Interaktion	$\Longleftrightarrow$	$\mathrm{e}^{-v(x_i-x_j)}$
Mittelung über zufällige Teilchen	$\Longleftrightarrow$	Spur
Symmetrisierung	$\Longleftrightarrow$	zufällige Permutation

- Feynman–Kac-Formel:

$$Z_N(\beta,\Lambda) = \underbrace{\int_\Lambda \mathrm{d}x_1 \cdots \int_\Lambda \mathrm{d}x_N}_{N \text{ Punkte in } \Lambda} \overbrace{\frac{1}{N!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_N}}^{\text{zufällige Permutation}} \underbrace{\bigotimes_{i=1}^N \mu^{(\beta)}_{x_i,x_{\sigma(i)}}}_{N \text{ Brown'sche Brücken}} \Big[\overbrace{\mathrm{e}^{-\sum_{1\le i<j\le N} V_\beta(B^{(i)},B^{(j)})}}^{\text{Interaktion}}\Big].$$

- Freie Energie im thermodynamischen Grenzwert (d.h. $|\Lambda_N| = N/\rho$):

$$f(\beta,\rho) = -\lim_{N\to\infty}\frac{1}{|\Lambda_N|}\log Z_N(\beta,\Lambda_N).$$

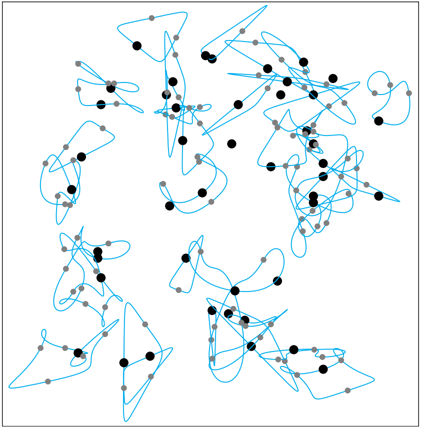


Ein Bosegas aus 14 Partikeln, aufgeteilt in drei Brown’sche Zykel, angeheftet an drei Poisson’sche Punkte (dick).
Der rote Zykel enthält sechs Partikel, der grüne und der blaue je vier.

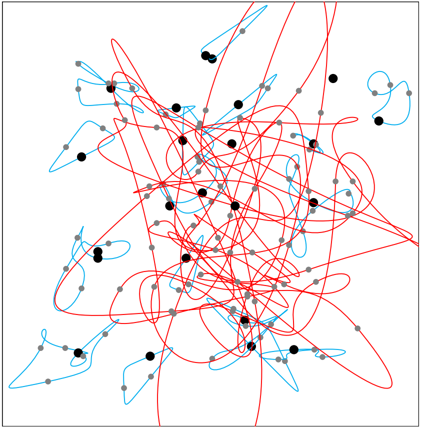
Bemerkungen

- Wir betrachten hier das kanonische Ensemble, wo die Zahl der Partikel N fest ist. Wenn N zufällig und Poisson-verteilt ist, spricht man vom großkanonischen Ensemble.
- Das interagierende Bosegas ist also ein Ensemble von interagierenden Brown'schen Schlingen verschiedener Länge in einer großen Box. Eine Schlinge der Länge k (d. h. mit Zeitinterval $[0, \beta k]$) hat genau k Partikel. Insgesamt gibt es $N = \sum_{k \in \mathbb{N}} k N_k$ Partikel (wenn N_k die Anzahl der Schlingen der Länge k ist).
- Eine natürliche Formulierung ist als ein zufälliger Punktprozess mit Marken ($=$ Schlingen) und Interaktionen zwischen den Schlingen.

BEK-Frage: Liegt ein makroskopischer Teil der N Partikel in "langen" Schlingen?



Subkritisches Bosegas
(kleine Partikeldichte)
ohne Kondensat



Superkritisches Bosegas
(große Partikeldichte)
mit zusätzlichem Kondensat (rot)

Der freie (= nichtinteragierende) Fall $v \equiv 0$

- Kein Raum, keine Box Λ.
- Keine Positionen $x_1, \dots, x_N$ der Partikel.
- Keine Brown'sche Bewegungen.
- Aber: Statistik der Zykellängen.

Der freie (= nichtinteragierende) Fall $v \equiv 0$

- Kein Raum, keine Box Λ.
- Keine Positionen $x_1, \dots, x_N$ der Partikel.
- Keine Brown'sche Bewegungen.
- Aber: Statistik der Zykellängen.

Referenz-Dichte der Zykellängen: $q_k = \frac{1}{k}(4\pi\beta k)^{-d/2}$.
Effektive Zykellängendichte: m_k. Partikeldichte: $\sum_{k\in\mathbb{N}} k m_k$.
Entropie: $H(m|q) = \sum_k (q_k - m_k + m_k \log \frac{m_k}{q_k})$.

freie Energie: $$f(\beta,\rho) = \inf\Big\{H(m|q) \colon m \in [0,\infty)^{\mathbb{N}}, \sum_{k\in\mathbb{N}} k m_k = \rho\Big\},$$

Der freie (= nichtinteragierende) Fall $v \equiv 0$

- Kein Raum, keine Box Λ.
- Keine Positionen $x_1, \dots, x_N$ der Partikel.
- Keine Brown'sche Bewegungen.
- Aber: Statistik der Zykellängen.

Referenz-Dichte der Zykellängen: $q_k = \frac{1}{k}(4\pi\beta k)^{-d/2}$.
Effektive Zykellängendichte: m_k. Partikeldichte: $\sum_{k\in\mathbb{N}} k m_k$.
Entropie: $H(m|q) = \sum_k (q_k - m_k + m_k \log \frac{m_k}{q_k})$.

freie Energie: $$f(\beta,\rho) = \inf\Big\{H(m|q)\colon m \in [0,\infty)^{\mathbb{N}}, \sum_{k\in\mathbb{N}} k m_k = \rho\Big\},$$

BEK-Frage: Gibt es ein minimierendes $(m_k)_{k\in\mathbb{N}}$?

- Kein Raum, keine Box Λ.
- Keine Positionen $x_1, \dots, x_N$ der Partikel.
- Keine Brown'sche Bewegungen.
- Aber: Statistik der Zykellängen.

Referenz-Dichte der Zykellängen: $q_k = \frac{1}{k}(4\pi\beta k)^{-d/2}$.
Effektive Zykellängendichte: m_k. Partikeldichte: $\sum_{k\in\mathbb{N}} k m_k$.
Entropie: $H(m|q) = \sum_k (q_k - m_k + m_k \log \frac{m_k}{q_k})$.

freie Energie: $$f(\beta,\rho) = \inf\Big\{H(m|q) \colon m \in [0,\infty)^{\mathbb{N}}, \sum_{k\in\mathbb{N}} k m_k = \rho\Big\},$$

BEK-Frage: Gibt es ein minimierendes $(m_k)_{k\in\mathbb{N}}$?

Euler–Lagrange-Gleichung: $m_k = q_k \mathrm{e}^{\alpha k}$ für $k \in \mathbb{N}$ mit dem Lagrange-Multiplikator $\alpha \in \mathbb{R}$.
Kritische (= größte erreichbare) Partikeldichte:

$$\rho_{\mathrm{c}}(\beta) = \sum_{k\in\mathbb{N}} k q_k = (4\pi\beta)^{-d/2} \sum_{k\in\mathbb{N}} k^{-d/2} \begin{cases} = \infty & \text{if } d \leq 2, \\ < \infty & \text{if } d \geq 3. \end{cases}$$

$\Longrightarrow$ Phasenübergang in $d \geq 3$, aber nicht in $d \leq 2$.

- Konstruktion interagierender zufälliger Punktprozesse im $\mathbb{R}^d$ mit zufälligen Schlingen ($\Longrightarrow$ statistische Mechanik, Gibbs-Maß-Theorie)
- Freie Energie in verschiedenen Regimes (Größe von Λ, Reskalierung von v, z.B. Mean-field oder hydrodynamischer Grenzwert)
- Ensembles zufälliger Zykellängen mit anderen Gewichten als q_k ($\Longrightarrow$ zufällige geometrische Permutationen oder Partitionen)
- Verwandte Modelle: Heisenberg-Modell, XY-Modell, ...
- Zusammenhang zwischen Bosegas und Ensembles von unendlich langen Brown'schen Bewegungen ($\Longrightarrow$ Brownian interlacements)
- Reflektions-Positivität ($\Longrightarrow$ interagierende Spinsysteme)