УДК 517.987
DOI 10.18413/2075-4639-2018-50-4-487-491

БИФУРКАЦИЯ ГИББСОВСКОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЫ

BIFURCATION OF GIBBS' DISTRIBUTION LATTICE SYSTEM

Л.П. Данилова
L.P. Danilova

Акционерное общество «Государственная страховая компания «Югория»,
Россия, 628011, г. Ханты-Мансийск, ул. Комсомольская, 61

AO UGORIA Insurance Company,
61 Komsomolskaya St, Khanty-Mansiysk, 628011, Russia

E-mail: 596268@bsu.edu.ru

Аннотация
В работе предлагается формула для значения химического потенциала, при котором происходит фазовый переход 1-го рода в модели решеточного газа. Эта формула распространяет на системы с произвольным суммируемым потенциалом взаимодействия применимость известной в равновесной статистической механике решеточных систем той формулы, которая получается как следствие теоремы Ли и Янга о распределении нулей статистических сумм в их зависимости от параметра активности.

Abstract
It is proposed the formula which defines the chemical potential when the phase transition 0f first order occurs in lattice gas model. Such a formula spreads the applicability of the formula which is known in equilibrium statistical mechanics of lattice systems and which is a sequence of the Lie-Yang theorem about distribution of partition function zeroes when they are considered as some functions on the fugacity parameter. As a result, the obtained formula may be applied for systems with arbitrary summable interaction potential.

Ключевые слова: решеточный газ, потенциал взаимодействия, статистическая сумма, активность, химический потенциал.
Keywords: lattice gas, interactionpotential, partition function, fugacity, chemical potential.

1. Введение

Фазовые переходы в решеточных моделях представляют собой, с математической точки зрения, бифуркации распределения вероятностей случайного гиббсовского поля на решетке $\boldsymbol{Z}^3$ при изменении параметров его распределения вероятностей. С физической точки зрения такие изменения обусловлены изменениями управляющих интенсивных термодинамических параметров. Бифуркации распределений вероятностей Гиббса сопровождаются возникновением существенных особенностей у аналитических зависимостей математических ожиданий от параметров распределения. Наличие такого рода особенностей сильно осложняет расчет термодинамических характеристик аналитическими методами. Любой метод их приближенного вычисления с гарантированными оценками точности подразумевает, что наличие фазовых переходов должно проявляться уже в низших порядках приближений.

Изучение фазовых переходов в системах статистической механики основано, главным образом, на двух различных по форме, но близких по своей сути концепциях. Исторически первая из них трактует бифуркацию распределения вероятностей как его неустойчивость по отношению к малым возмущениям гамильтониана в *термодинамическом пределе*. При реализации такой неустойчивости некоторые из математических ожиданий принимают разные значения в зависимости от выбора вида бесконечно малого возмущения. Таким образом, следуя Н.Н. Боголюбову, для однозначного построения распределения вероятностей случайного поля, в дополнение к исходному гамильтониану, должно добавляться сколь угодно малое слагаемое, ответственное за *выбор термодинамической фазы* [1]. Нужно заметить, что такая трактовка не отражает в полной мере физическое представление о фазовом переходе 1-го рода, из-за присутствия при таких переходах явления гистерезиса. Вторая математическая трактовка термодинамических фазовых переходов теоретико-вероятностная. Она рассматривает их в виде появления неединственности случайного поля, которое соответствует фиксированному бесконечному набору гиббсовских условных вероятностей, порождаемых т. н. *относительными гамильтонианами*, которые определяют [2] гиббсовское случайное поле в термодинамическом пределе.

Что касается моделей типа решеточного газа, то для изучения фазового перехода 1-го рода газ-жидкость в таких системах допустимо использование чисто аналитического подхода. Это следует из того, что, несмотря на отсутствие гистерезиса при таком переходе, возникновение соответствующего ему параметра порядка, а именно, скачка средней плотности частиц при изменении давления, не связано, напрямую, с нарушением симметрии в системе. Поэтому нет необходимости изучать переход газ-жидкость на основе малых возмущений гамильтониана. В то же время, если отказаться от изучения термодинамических состояний с наличием нескольких сосуществующих одновременно термодинамических фаз, то нет необходимости в использовании для изучения перехода газ-жидкость подхода Р.Л. Добрушина. Оказывается вполне достаточным трактовать фазовый переход газ-жидкость в рамках теории конденсации Ли и Янга [3], а именно, как появление существенной особенности в аналитических зависимостях математических ожиданий от интенсивных термодинамических параметров.

Основная идея при построении приближений для давления в системе на основе формализма статистической механики восходит к знаменитой серии работ [5–7]. Она заключается в том, что при правильном введении в потенциал взаимодействия дополнительного параметра r_0, который имеет смысл радиуса взаимодействия, то в пределе $r_0 \to \infty$ для термодинамических функций должны получаться те значения, которые находятся в рамках приближения т. н. самосогласованного поля.

Изменения агрегатных состояний, несмотря на физическую прозрачность, являются, по-видимому, самыми сложными для изучения с микроскопической точки зрения фазовыми переходами. Первая попытка изучения перехода газ-жидкость в рамках статистической механики относится к 1938 г., когда Дж. Майер [8] попытался интерпретировать этот фазовый переход как проявление некоторой ближайшей к нулю точки неаналитичности функции, представленной степенным рядом по параметру активности z и расположенной на вещественной оси в комплексной плоскости этого параметра. Хотя аналогичные подходы в то же время развивались в работах [9, 10], а также других авторов, как стало понято позднее, в процессе развития статистической математической физики, такая интерпретация фазового перехода газ-жидкость оказалась неправильной. Указанный математический механизм не может реализовываться в рамках формализма статистической механики.

В дальнейшем при изучении фазовых переходов в моделях статистической механики, связанных с другими физическими явлениями, стало понятно, что появление особенностей у термодинамических функций связано с термодинамическим предельным переходом. Необходимость осуществления такого перехода в процессе вычисления этих функций является отражением того, что изучаемые системы являются очень большими. Революционной в этом отношении была работа Л. Онсагера [11], в которой он, в частности, обнаружил, что в зависимости теплоемкости двумерной модели одноосного ферромагнетика от температуры появляется логарифмическая особенность.

Очень важным достижением в области исследования фазового перехода газ-жидкость являются работы [3, 4]. Изучая распределение нулей статистических сумм как функций активности z в моделях решеточного газа с потенциалами притяжения, они доказали очень важную теорему о том, что все нули по переменной z расположены на окружности, и, на основе этого факта, предложили математический механизм реализации фазового перехода газ-жидкость, который, наверняка, реализуется в указанных моделях. В этой теории фазовый переход связывался с наличием в определенной области изменения температуры множества особенностей по переменной z, которое приводит к разбиению комплексной плоскости z на две области, между которыми имеется связь только через одну точку на вещественной оси, и поэтому давление как функция от z распадается на две аналитические функции, которые не могут быть связаны друг с другом процедурой аналитического продолжения. Следующим достижением в области изучения фазового перехода газ-жидкость является, по нашему мнению, уже упомянутые выше работы М. Каца, Хеммера, Г.Е. Уленбека. Изучая одномерную модель газа с потенциалом взаимодействия, который позволял свести исследование системы к изучению специальной марковской цепи с условными вероятностями перехода, связанными со случайным процессом Орнштейна-Уленбека, ими было обнаружено, что дополнительный предельный переход к бесконечному значению радиуса взаимодействия приводит к Ван-дер-Ваальсовскому выражению для уравнения состояния газа, дополненному т. н. правилом Максвелла. Таким образом, в этом пределе в системе проявляется скачок плотности числа частиц. В реальных системах радиус взаимодействия не является большой величиной по сравнению, например, со средним расстоянием между частицами. Тем не менее эта работа важна в идейном отношении хотя бы потому, что, с физической точки зрения, в области изменения параметров, в которой происходит фазовый переход, роль радиуса взаимодействия выполняет радиус корреляций, который оказывается, действительно, очень большим.

Опишем кратко дальнейшее развитие направления, которому посвящена работа. Значительные усилия были потрачены на установление радиусов сходимости групповых (по степеням z) и вириальных (по степеням плотности частиц) разложений для давления и набора корреляционных функций, полностью определяющих распределение вероятностей точечного случайного поля, которое порождается системой статистической механики в термодинамическом пределе. Так как эти радиусы сходимости зависят от интенсивных термодинамических параметров, то они характеризуют область изменения этих параметров, в которой любые фазовые переходы в системе отсутствуют. К этому направлению исследований относятся работы [12–15]. Значительное внимание было уделено изучению допустимых с точки зрения термодинамики потенциалов взаимодействия. Среди них был выделен класс термодинамически устойчивых и быстроубывающих потенциалов [16]. Это направление исследований в статистической математической физике важно с той точки зрения, что только потенциалы, принадлежащие обоим этим классам, приводят к т. н. *экстенсивной термодинамике*.

В работе 1967 г. [17] доказано наличие фазового перехода первого рода в решеточном газе при достаточно низких температурах и в условиях, когда доминирующую роль играет область притяжения у потенциала взаимодействия. Следует упомянуть также выполненные в то же время работы [18, 19], в которых были получены аналогичные результаты. Этот этап развития статистической математической физики суммирован в монографии [20].

Для исследования фазового перехода газ-жидкость очень важна априорная информация о том, при каких значениях параметра активности z возможен фазовый переход. Для систем с потенциалом притяжения такая информация дается, как уже было сказано выше, теоремой Ли-Янга о расположении нулей по переменной z их статистических сумм. Однако потенциалы притяжения представляют хотя и важный тип потенциалов, но все же он довольно узок с точки зрения приложений к конкретным системам статистической механики. Поэтому в настоящей работе мы уделяем внимание получению обобщения теоремы Ли и Янга, которое позволяет определять положение фазового перехода.

2. Обобщение теоремы Ли и Янга

Пусть для любого конечного подмножества $X \subset \Omega \subset \boldsymbol{Z}^3, \Omega = \{\mathbf{x} = n_1 e_1 + n_2 e_2 + n_3 e_3;\ n_j = 0 \div L,\ j = 1,2,3\}$ задан функционал

$$H(X) = -|X|\mu + \sum_{\{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\}\subset X} U(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}), \tag{1}$$

где функция $U: \mathbf{Z}^3 \to R$ такова, что $U(\boldsymbol{z}) \leq 0, \|U\| = \sum_{\boldsymbol{x}\in \boldsymbol{Z}^3} |U(\mathbf{x})| < \infty,\ U(0) = 0$. Этот функционал, называемый гамильтонианом, порождает гиббсовскую вероятностную меру решеточной системы статистической механики [3],

$$P\{X\} = Z^{-1}\exp(-H(X)/T), \quad T > 0; \quad Z = \sum_{X\subset\Omega} \exp(-H(X)/T), \tag{2}$$

то есть распределения вероятностей гиббсовского случайного дихотомического поля $\{\rho\}$ на $\boldsymbol{Z}^{\boldsymbol{3}}$ со случайными реализациями $\{\rho(\mathbf{x}) = 1;\ \mathbf{x} \in X | \rho(\mathbf{x}) = 0;\ \mathbf{x} \notin X\}$. Обозначим $z = e^{\mu/T}$ и определим функцию $p(z,T)$, который называется давлением в решеточной системе

$$p(z,T) \equiv \lim_{\Omega\to\Lambda} |\Omega|^{-1} \ln \sum_{X\subset\Omega} z^{|X|} \exp[-U(X)/T]. \tag{3}$$

Положим, что

$$\zeta = z\lambda(T), \lambda(T) = \exp\left[-\frac{1}{2T}\sum_{\mathbf{x}\in\Lambda} U(\mathbf{x})\right].$$

Согласно известной теореме (см. [3–4] [18]), нули полиномов

$$Z = \sum_{X\subset\Omega} z^{|X|} \exp(-U(X)/T) \tag{4}$$

по переменной $\zeta \in C$ при любом значении L$\in N$ лежат на единичной окружности. Тогда справедлива

Теорема. *Функция* $\pi(\zeta) = p(z,T)$ *при фиксированном значении* T *продолжается с интервала* $0 < \zeta < 1$ *до функции* $p(\zeta,T)$ *, аналитической в круге* $\{\zeta: |\zeta| < 1\}$ *, а с интервала* $1 < \zeta < \infty$ *до функции* $p(\zeta^{-1},T) + \ln\zeta$.

При изменении параметра T возможна реализация положения, когда при одних его значениях указанные аналитические функции являются представлением единой аналитической функции, а, при других, значениях эти функции не являются аналитическими продолжениями друг друга. В этом случае распределение вероятностей Гибсса дискретного дихотомического случайного поля на $\boldsymbol{Z}^3$ испытывает бифуркацию при переходе через граничные точки интервалов значений T , в которых реализуются указанные два различных положения. Ввиду указанной теоремы, такая бифуркация в распределения вероятностей возможна только при $\zeta = 1$ (см. [4], [18]).

Справедливо следующее утверждение для решеточной системы с гамильтонианом вида (1), для которого, однако, не налагается условие неположительности функции U.

Теорема. *Пусть для гиббсовского случайного дихотомического поля* $\{\rho\}$ *гамильтониан* H*, определенный (1), такой, что* $\|U\| < \infty$*. Тогда, если для давления* $p(z,T)$*, определенного как функция параметров z и T согласно равенству*

$$p(z,T) = \lim_{\Omega \to \Lambda} |\Omega|^{-1} \ln \sum_{X \subset \Omega} \exp[-H(X)/T],$$

имеется только одно значение T, *при котором происходит бифуркация распределения вероятностей (2), то эта функция продолжается аналитическим образом с интервала* $0 < z < \lambda^{-1}(T)$, *до функции* $p(z,T)$, *аналитической в круге* $\{z: |z| < \lambda^{-1}(T)\}$, *а с интервала* $\lambda^{-1}(T) < z < \infty$ *до функции* $p(z^{-1},T) + \ln(z\lambda(T))$, *аналитической в области* $\{z: |z| > \lambda^{-1}(T)\}$, *и поэтому бифуркация распределения вероятностей возможна только при* $z = \lambda^{-1}(T)$.

Списоклитературы
References

1. Боголюбов Н.Н. 1971. Квазисредние в задачах статистической механики. Собрание сочинений в 3-х томах. т. 3. Киев, Наукова думка.

BogoliubovN.N. 1971. Quasi-averages in statistical mechanics problems. Collected works, V.3. Kiev, Naukova Dumka.

2. Добрушин Р.Л. 1968. Гиббсовские случайные поля для решетчатых систем с попарным взаимодействием. Функциональный анализ и его приложения, 4: 31–43.

DobrushinR.L. 1968. Gibbs' random fields of lattice systems with pair interaction. Functional analysis and its application, 4 : 31–43.

3. Yang C.N., Lee T.D. 1952. Statistical Theory of Equation of State and Phase Transitions. I.Theory of Condensation. Phys. Rev., 87 : 404–409.

4. Yang C.N., Lee T.D. 1952. Statistical Theory of Equation of State and Phase Transitions.II. Lattice Gas and Ising Model. Phys. Rev., 87 :410–419.

5. Kac M., Uhlenbeck G.E., Hemmer P.C. 1963. On the van der Waals theory of the vapor-liquidequilibrium. I. Discussion of a onedimensional model. J.Math. Phys., 4. 2 :216–228.

6. Kac M., Uhlenbeck G.E., Hemmer P.C.1963. On the van der Waals theory of the vapor-liquidequilibrium. II. Discussion of the distribution functions. J.Math. Phys., 4. 2: 229–247.

7. Kac M., Uhlenbeck G.E., Hemmer P.C.1964. On the van der Waals theory of the vapor-liquidequilibrium. III. Discussion of the critical region. J.Math. Phys., 5. 1 :60–74.

8. Mayer J., Harrison S.F. 1938. Statistical mechanics of condensing systems. IV. Journal ofChemical Physics., 6 :101–104.

9. Born M., Fuchs K.1938. The statistical mechanics of condensing systems. Proc. Roy. Soc. A166; 929 : 391–414.

10.Kahn B. and Uhlenbeck G.E. 1938. On the theory of condensation. Physica, 5 : 399–416.

11. Onsager L. Crystal Statistics.1944. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. Phys.Rev., 65 : 117–149.

12. Lebowitz J.L., Penrose O.1964. Convergence of Virial Expansions. J. Math. Phys., 5 : 841–847.

13. Penrose O.1963. Convergence of Fugacity Expansions for Fluids and Lattice Gases. J. Math.Phys., 4 : 1312–1320.

14. Penrose O. 1963. The Reminder in Mayer's Fugacity Series. J. Math. Phys., 4 : 1488–1494.

15.Groeneveld J.1962. Two Theorems of Many-Particle Systems. Physics Letters, 3 : 50–51.

16. Fisher M.E., Ruelle D.1966. The Stability of Many-Particle Systems. J.Math. Phys., 7 : 260–270.

17. Ginibre J. Grossman A., Ruelle D.1966. Condensation of Lattice Gases. Commun. Math. Phys., 3 : 187–193.

18. Ruelle D.1969. Statistical Mechanics. Rigorous Results. Ney York-Amsterdam: W.A. Benjamin, Inc.

19. Fisher M.E.1967. The Theory of Condensation and the Critical Point. Physics., 3 : 255–283.

20.Dobrushin R.L.1967. Existence of phase transition in models of a lattice gas. Proc. V Berk. Symp. Mat.Stat. Prob., VII A. : 73–87.